

THEORIE DER SUPRALEITUNG IN BINÄREN ÜBERGANGSMETALL-LEGIERUNGEN

Inaugural - Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von
Günther Kerker
aus Berlin

1975



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41533913_0033

THEORIE DER SUPRALEITUNG IN BINÄREN ÜBERGANGSMETALL-LEGIERUNGEN

Inaugural - Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von
Günther Kerker
aus Berlin

1975



1. Referent : Prof. K. H. Bennemann

2. Referent : Prof. R. Seiler

Tag der mündlichen Prüfung: 19. März 1975

INHALTSÜBERSICHT

=====

	Seite
ABSTRACT	3
I. EINLEITUNG	4
II. THEORETISCHE BEHANDLUNG DES LEGIERUNGSPROBLEMS	10
(1) Normalleitende Legierungen in der Coherent Potential Approximation	10
(2) Erweiterung der CPA auf supraleitende Legierungen (Weak-coupling Formulierung)	16
(3) Anwendung der CPA auf die Eliashberg-Theorie der Strong-coupling Supraleitung in Legierungen	34
III. DISKUSSION UND NUMERISCHE ANALYSIS	55
IV. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	79
ANHANG A	82
Die Coherent Potential Approximation	82
(a) Ableitung aus der Theorie der Vielfachstreuung	82
(b) Locator-Formulierung der CPA	88
(c) CPA mit konfigurationsabhängigen Hopping-Integralen	90
ANHANG B	93
Ableitung der Symmetrie-Relationen für die Nambu-Green- Funktion	93
ANHANG C	95
Die Selbstkonsistenzgleichung für den effektiven Ordnungs- parameter einer BCS-supraleitenden Legierung	95
ANHANG D	99
Die Integralgleichungen für die lokalen Ordnungsparameter in der Strong-coupling Theorie	99

ANHANG E	102
Computer-Programm-Beschreibung zur Berechnung der	
numerischen Beispiele	102
LITERATURVERZEICHNIS	110

ABSTRACT

In dieser Arbeit wird eine Theorie formuliert, die es gestattet, das supraleitende Verhalten von Übergangsmetall-Legierungen A_xB_{1-x} über den gesamten Konzentrationsbereich x zu studieren.

Zu diesem Zweck wird die herkömmliche Coherent-Potential-Approximation (CPA) auf supraleitende Legierungen von d-Band-Metallen verallgemeinert. Die Methode wird zuerst für einen BSC-Supraleiter entwickelt und dann auf die Theorie für Strong-coupling-Supraleitung von Eliashberg erweitert.

Aus dem über die Legierung gemittelten Ordnungsparameter findet man in beiden Fällen Ausdrücke für die effektive Elektron-Phonon-Wechselwirkungskonstante und die entsprechende Coulomb-Wechselwirkungskonstante, aus denen die supraleitende Sprungtemperatur der Legierung für alle Konzentrationen berechnet werden kann.

Die numerischen Resultate reproduzieren den experimentell bekannten Verlauf der Sprungtemperatur in Abhängigkeit von der Konzentration.

I. EINLEITUNG

Die interessantesten Supraleiter mit hoher supraleitender Sprungtemperatur findet man unter den Legierungen der drei Übergangsmetallreihen. Die experimentellen Daten dieser Verbindungen sind seit langem bekannt¹. Innerhalb homogener supraleitender Phasen von binären oder höheren Systemen variiert z.B. die kritische Temperatur kontinuierlich, jedoch durchaus nicht immer monoton oder gar linear, als Funktion der Konzentration. Das wohl bekannteste Beispiel dafür sind die empirischen Regeln von Matthias² für die Variation der Sprungtemperatur T_c als Funktion der mittleren Anzahl der Valenzelektronen $\frac{e}{a}$ in den drei Übergangsmetallreihen (Fig.1). Sie besagen, daß Metalle und Legierungen besonders dann hohes T_c besitzen, wenn $\frac{e}{a}$ im Bereich von 5 oder 7 liegt. Für Legierungen erhält man nichtganzzahlige Werte für $\frac{e}{a}$. Interessant ist, daß manche Legierungen in einem gewissen Konzentrationsbereich sogar höhere Sprungtemperaturen besitzen als die reinen Konstituenten, etwa $Nb_{0.75}Zr_{0.25}$ oder $Mo_{0.5}Tc_{0.5}$.

Im Prinzip läßt sich jedes Übergangsmetall mit einem anderen Übergangsmetall legieren, gleichgültig an welcher Stelle beide Elemente im Periodensystem stehen. Das Verhalten von T_c für einige Legierungen von Übergangsmetallen, die im periodischen System nicht nebeneinander stehen, ist in Fig. 2 dargestellt.

Um die physikalischen Mechanismen, die den Matthias-Regeln zugrunde liegen und um überhaupt die Supraleitung in d-Band-Metallen besser zu verstehen, ist eine Theorie für Supraleitung in Übergangs-Metall-Legierungen von grundlegender Bedeutung.

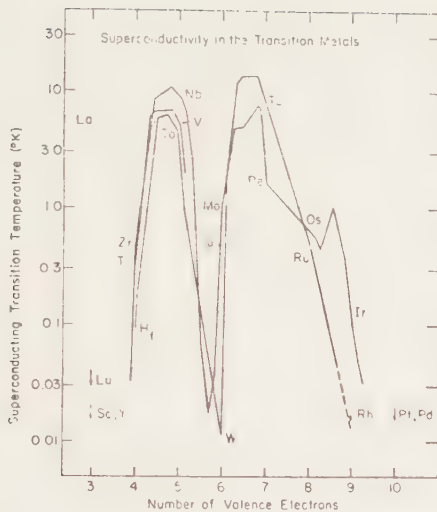


Fig. 1

Sprungtemperaturen
der Übergangsmetalle
und ihrer Legierungen
in Abhängigkeit von
der Anzahl der Valenz-
elektronen

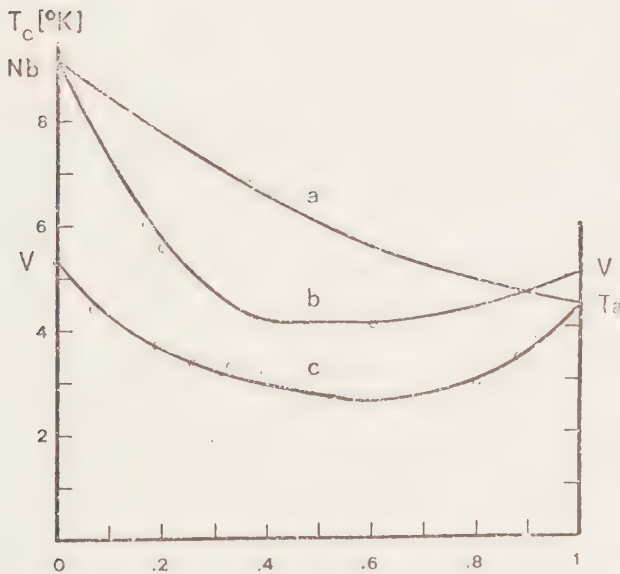


Fig. 2

T_c -Verlauf einiger
binärer Übergangs-
metall-Legierungen
in Abhängigkeit von
der Konzentration

Im folgenden wird daher eine Theorie entwickelt, die imstande ist, die verhältnismäßig komplizierte Abhängigkeit der supraleitenden Sprungtemperatur von der Konzentration richtig zu beschreiben. Bisher sind supraleitende Legierungen theoretisch lediglich im Rahmen einiger Sonderfälle behandelt worden:

- (a) Verdünnte Legierungen³
- (b) Legierungen im "rigid-band" - Modell^{4,5}
- (c) Legierungen, für die Andersons Theorem⁶ gilt, d.h. der Ordnungsparameter (und damit die Elektron-Phonon-Wechselwirkung) wird räumlich konstant angenommen⁷.

Eine allgemeine Theorie der Supraleitung in Legierungen vom Typ A_xB_{1-x} (x ist die Konzentration des A-Anteils) mit räumlich variierender Elektron-Phonon- und Coulomb-Wechselwirkung ist jedoch noch nicht formuliert worden.

Zweck dieser Arbeit ist es daher, eine mikroskopische Theorie der Supraleitung in binären Übergangsmetall-Legierungen zu entwickeln, die es gestattet, das supraleitende Verhalten der Legierung über den gesamten Konzentrationsbereich zu berechnen, und die alle Sonderfälle enthält. Der wesentliche Gedanke dieser Theorie beruht auf der Anwendung der Coherent Potential Approximation (CPA)⁸ auf supraleitende Legierungen. Auf diese Weise wird es möglich, die folgenden Zusammenhänge systematisch zu untersuchen: Die Abhängigkeit der Elektron-Phonon-Kopplungskonstanten, insbesondere der elektronischen Matrixelemente der Elektron-Phonon-Wechselwirkung und der Sprungtemperatur von der Zusammensetzung der Legierung bzw. von der Position und der Breite des d-Bandes der einzelnen Konstituenten. Die Methode wird im 2. Abschnitt des Kapitels II ausführlich am Beispiel eines BCS-Supraleiters entwickelt²⁴ und im 3. Abschnitt auf die Eliashberg-Theorie für Strong-coupling Supraleitung verallgemeinert²⁵. Diese Verallgemeinerung ist wichtig, da die

meisten Übergangsmetalle "Strong-coupling" Supraleiter sind.

Zum besseren Verständnis der in Kapitel II beschriebenen Theorie seien hier einige Einzelheiten erwähnt. In der BSC-Theorie⁹ findet man bekanntlich für die Sprungtemperatur den Ausdruck

$$T_c \sim \Theta_D \exp \left\{ - \frac{1}{N(0) V} \right\} , \quad (1)$$

wobei Θ_D die Debye-Temperatur, $N(0)$ die elektronische Zustandsdichte an der Fermikante und V ein Parameter ist, der die Elektron-Phonon-Wechselwirkung λ und die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung U enthält. Die in dieser Arbeit formulierte Theorie liefert für die Legierung ein V_{eff} , das von den Parametern der reinen Metalle abhängt

$$V_{\text{eff}} = f(\lambda_A, \lambda_B, U_A, U_B, X, \delta) . \quad (2)$$

δ ist ein CPA-Parameter, der angibt, wie weit die d-Band-Zentren der reinen Metalle energetisch auseinander liegen. $N(0)$ für die Legierung wird mit Hilfe der CPA berechnet. Das Zusammenspiel dieser Parameter legt den T_c -Verlauf über den gesamten Kompositionsbereich fest. Sämtliche Sonderfälle (verdünnte Legierung, weak scattering, split band, rigid band etc.) sind in (2) enthalten. Legierungen wie etwa $\text{Zr}_x\text{Rh}_{1-x}$, bei der für $1 \geq x \geq 0.9$ $^{\circ}\text{K}$ die kritische Temperatur von 0.55 $^{\circ}\text{K}$ auf 6 $^{\circ}\text{K}$ ansteigt, obwohl reines Rh infolge starker Coulomb-Wechselwirkung keine Supraleitung zeigt, lassen sich mit dieser Theorie ebenfalls erklären.

Mit der Verfeinerung der BCS-Theorie durch Eliashberg und Nambu¹¹ unter Berücksichtigung einer starken Elektron-Phonon-Kopplung hat die detaillierte Struktur des Phononenspektrums an Bedeutung gewonnen. Anstelle von (1) tritt in diesem Falle näherungsweise die McMillan - Formel⁴

$$T_c = \frac{\langle \omega^2 \rangle^{1/2}}{1.20} \exp \left\{ - \frac{1 + \lambda}{0.96\lambda - \mu^*(1 + 0.6\lambda)} \right\}. \quad (3)$$

λ ist hier eine dimensionslose Elektron-Phonon-Kopplungskonstante, μ^* das Coulomb-Pseudopotential und $\langle \omega^2 \rangle^{1/2}$ eine gemittelte Phononenfrequenz. Mc Millan findet für λ den Ausdruck⁴

$$\lambda = \frac{N(0) \langle J^2 \rangle}{M \langle \omega^2 \rangle}. \quad (4)$$

Dabei ist $\langle J^2 \rangle$ ein über die Fermioberfläche gemitteltes Elektron-Ion Matrixelement und M die Ionenmasse. In einer Legierung ist unklar, welche Werte man für diese Größen einzusetzen hat, vorausgesetzt, daß der Ausdruck (4) in dieser Form überhaupt gültig ist. Die häufig analog zu den "refractory"-Metallen gemachte Annahme²⁸

$$\lambda = f_1(\lambda_A) + f_2(\lambda_B), \quad (5)$$

wobei λ_A und λ_B die Kopplungskonstanten der reinen Metalle A und B sind, ist im allgemeinen Fall sicherlich eine sehr grobe Näherung, da sie

Jede Korrelation zwischen den A- und B-Atomen in der Legierung sowohl in den elektronischen Matrixelementen als auch im Phononenspektrum außer acht läßt. Verallgemeinert man nun die CPA auf supraleitende Legierungen mit starker Elektron-Phonon-Wechselwirkung, so kann man dennoch analog zur BCS-Theorie ein effektives Matrix-Element $\langle J^2 \rangle$, eine effektive Elektron-Phonon-Kopplungskonstante λ_{eff} und eine effektive Coulomb-Kopplungskonstante μ_{eff}^* für die Legierung definieren, die sich unter gewissen Einschränkungen wiederum aus den entsprechenden Parametern der reinen Metalle A und B ausdrücken lassen. Darüberhinaus gestattet es die Strong-coupling-Formulierung dieser Theorie, den Einfluß der einzelnen Konstituenten nicht nur auf die elektronischen Matrixelemente sondern auch auf das Phononenspektrum der Legierung explizit zu untersuchen. Die Variation der elektronischen Matrixelemente und die Änderungen im Phononenspektrum in Abhängigkeit von der Zusammensetzung der Legierung legen im wesentlichen den T_c -Verlauf fest. Mit Hilfe der in dieser Arbeit formulierten Theorie kann man zum ersten Mal bei Gültigkeit von Gleichung (4) zuverlässig herausfinden, ob $\langle \omega^2 \rangle$ oder $\langle J^2 \rangle$ sich beim Legieren vorwiegend verändern und die Supraleitung beeinflussen. Es sei jedoch dazu bemerkt, daß die Theorie unabhängig davon ist, ob die effektive Elektron-Phonon-Kopplungskonstante der Legierung in der Form der Gleichung (4) ausgedrückt werden kann oder nicht.

In Kapitel III wenden wir die Theorie auf einige charakteristische Übergangsmetall-Legierungen an. Die numerischen Resultate stimmen über den gesamten Konzentrationsbereich recht gut mit den empirischen Daten überein.

In Kapitel IV diskutieren wir einige Anwendungsmöglichkeiten der Theorie auf die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in normalleitenden Legierungen und auf ungeordnete quasi-eindimensionale Systeme.

II. THEORETISCHE BEHANDLUNG DES LEGIERUNGSPROBLEMS

(1) Normalleitende Legierungen in der Coherent Potential Approximation

Bevor wir auf supraleitende Legierungen näher eingehen, geben wir zunächst eine kurze Darstellung der Coherent Potential Approximation (CPA), wie sie für normalleitende Legierungen entwickelt worden ist^{8,12}. Eine substitutionell ungeordnete Legierung wird durch einen Ein-Teilchen-Hamiltonoperator

$$H = W + D = W + \sum_n D_n \quad (\text{II, 1.1})$$

beschrieben. Der Operator W besitzt die Periodizität des Gitters und ist somit konfigurationsunabhängig. Der Operator D läßt sich als Summe von konfigurationsabhängigen Beiträgen D_n schreiben, die von den einzelnen Gitterplätzen n herrühren.

Die elektronischen Eigenschaften der Legierung erhält man aus der konfigurationsgemittelten Ein-Teilchen-Greenfunktion

$$\langle G(z) \rangle = \langle (z - D - W)^{-1} \rangle = (z - \Sigma_{op} - W)^{-1}. \quad (\text{II, 1.2})$$

$\langle \dots \rangle$ beschreibt die Mittelung über alle möglichen Verteilungen der Atome von der Sorte A, B, C, ... im Gitter. Die T-Matrix für eine vorgegebene Konfiguration in der Legierung ist durch die Gleichung

$$G = \langle G \rangle + \langle G \rangle T \langle G \rangle \quad (\text{II, 1.3})$$

definiert. Aus (II, 1.3) folgt die Selbstkonsistenzbedingung

$$\langle T[\Sigma_{op}] \rangle = 0 \quad , \quad (\text{II, 1.4})$$

die den "Selbstenergie"-Operator $\Sigma_{op}(z) = \Sigma(z) \cdot 1_{op}$ festlegt. Mit Hilfe der Zerlegung

$$D - \Sigma_{op} = \sum_n V_n \quad (\text{II, 1.5})$$

kann man einen lokalen Streuoperator

$$T_n = V_n (1 - \langle G \rangle V_n)^{-1} \quad (\text{II, 1.6})$$

definieren, der die Streuung eines Elektrons am Gitterplatz n beschreibt, wenn man dort das effektive "Potential" $\sum$ durch das "Störpotential" $D_n - \sum$ ersetzt.

In der CPA erhält man anstelle der allgemeinen Selbstkonsistenz-Bedingung (II, 1.4) die "single-site"-Approximation. (Siehe Anhang A)

$$\langle T_n[\Sigma] \rangle = 0 \quad . \quad (\text{II, 1.7})$$

Die Bedingung (II, 1.7) besagt physikalisch, daß im Mittel die totale Streuung an einem Gitterplatz verschwindet.

Im konkreten Fall betrachtet man ein einfaches tight-binding Ein-Band-Modell¹² mit dem Hamiltonian

$$H = \sum_{i,\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \quad (\text{II, 1.8})$$

$$\equiv D + W .$$

$c_{i\sigma}^{\dagger}$ bzw. $c_{i\sigma}$ ist der übliche Erzeugungs-bzw. Vernichtungsoperator für ein Elektron mit Spin σ in einem Wannier-Zustand $|i\rangle$. In der tight-binding-Näherung ist $\phi_i(\underline{r}) = \langle \underline{r} | i \rangle$ ein atomares Orbital. Die Matrixelemente des nichtdiagonalen Anteils W von H in (II, 1.8) sind die Überlapp- oder Hopping-Integrale t_{ij} . Sie können konfigurationsunabhängig angenommen werden, wenn die reinen Konstituenten der Legierung annähernd gleiche Bandbreiten besitzen. W ist dann diagonal in der Bloch-Darstellung

$$\langle \underline{k}' | W | \underline{k} \rangle = \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}_{0j}} \equiv \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \epsilon_{\underline{k}} . \quad (\text{II, 1.9})$$

Die Matrixelemente ϵ_i des diagonalen Anteils D von H sind die lokalen Energie-Niveaus. Sie hängen in statistischer Weise von der Konfiguration in der Legierung ab. Im Falle einer binären Legierung $A_x B_{1-x}$ kann ϵ_i die Werte ϵ_A oder ϵ_B annehmen, wenn der i -te Gitterplatz mit einem Atom von der Sorte A oder der Sorte B besetzt ist. Dabei sind x und $y = 1 - x$ die Konzentrationen der A- und B- Atome.

Es erweist sich als zweckmäßig, den Parameter δ einzuführen durch

$$\delta = (\epsilon_A - \epsilon_B) / W \quad (\text{II, 1.10})$$

und die Energien so zu messen, daß

$$\varepsilon_A = \frac{1}{2} w \delta \quad , \quad \varepsilon_B = -\frac{1}{2} w \delta \quad . \quad (\text{II}, 1.11)$$

Der "scaling"-Parameter w ist gleich der halben Bandbreite.

In der Grenze $\delta \rightarrow 0$ erhält man einen periodischen Kristall mit dem Hamiltonian $H = W$. Die Größen, die sich auf diesen Kristall beziehen, erhalten den Index "(0)". So ist etwa die Ein-Teilchen-Greenfunktion durch

$$G^{(0)}(z) = (z - W)^{-1} \quad (\text{II}, 1.12)$$

gegeben, woraus für die Zustandsdichte die Beziehung

$$\begin{aligned} \rho^{(0)}(E) &= -\frac{1}{\pi N} \operatorname{Im} \operatorname{Sp} G^{(0)}(E+i0) \\ &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle i=0 | G^{(0)}(E+i0) | i=0 \rangle \quad (\text{II}, 1.13) \\ &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} F^{(0)}(E+i0) \end{aligned}$$

folgt. Die konfigurationsgemittelte Greenfunktion der Legierung (II, 1.2)

läßt sich damit in einfacher Weise durch $G^{(0)}$ ausdrücken. Es ist

$$\langle G \rangle = (z - W - \Sigma(z))^{-1} = G^{(0)}(z - \Sigma(z)) \quad (\text{II}, 1.14)$$

bzw.

$$F(z) \equiv \langle 0 | \langle G \rangle | 0 \rangle = F^{(0)}(z - \Sigma(z)). \quad (\text{II}, 1.15)$$

Wegen $\langle i | V_n | j \rangle = \delta_{in} \cdot \delta_{jn} \cdot V_i$ folgt eine einfache Koster-Slater-Form²⁵ für die in (II, 1.6) definierte lokale Streumatrix T_n

$$T_n = |n\rangle (\varepsilon_n - \Sigma(z)) (1 - (\varepsilon_n - \Sigma(z)) F(z))^{-1} \langle n|. \quad (\text{II}, 1.16)$$

Die "single-site"-Selbstkonsistenzbedingung (II, 1.7) liefert die Gleichung

$$\frac{x(\varepsilon_A - \Sigma)}{1 - (\varepsilon_A - \Sigma) F} + \frac{y(\varepsilon_B - \Sigma)}{1 - (\varepsilon_B - \Sigma) F} = 0 \quad (\text{II}, 1.17)$$

zur Bestimmung von $\Sigma(z)$. Zu (II, 1.17) äquivalent sind die "Soven"-Gleichung⁸

$$\Sigma(z) = x\varepsilon_A + y\varepsilon_B - (\varepsilon_A - \Sigma(z)) F(z) (\varepsilon_B - \Sigma(z)) \quad (\text{II}, 1.18)$$

und die Gleichung¹²

$$\Sigma(z) = x\varepsilon_A + y\varepsilon_B + \frac{xy\delta^2 F(z)}{1 + (x\varepsilon_A + y\varepsilon_B + \Sigma(z)) F(z)} \quad (\text{II}, 1.19)$$

Die Lösung erfordert neben der Vorgabe der Parameter x und δ die Kenntnis von $F^{(0)}(z)$. Eine Bestimmung von W ist überflüssig. Da $F^{(0)}(z)$ analytisch ist bis auf einen Schnitt entlang der reellen Achse, gilt die Kramers-Kronig-Beziehung

$$F^{(0)}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{z - E} \rho^{(0)}(E). \quad (II, 1.20)$$

$F^{(0)}(z)$ wird demnach vollständig durch die Zustandsdichte des ungestörten Kristalls bestimmt.

Anhang A bringt mehr über die CPA.

(2) Erweiterung der CPA auf supraleitende Legierungen (Weak-coupling Formulierung)

Im vorhergehenden Kapitel wurde kurz die CPA als Legierungstheorie für normalleitende Legierungen behandelt. Im einfachsten Fall wird die Legierung dabei durch den tight-binding Modell-Hamiltonian (II, 1.8) beschrieben. Im Falle eines supraleitenden Systems muß dieser Hamiltonian um einen Term H_1 erweitert werden, der im wesentlichen die Elektron-Phonon-Wechselwirkung enthält, die für die Supraleitung verantwortlich ist. Im folgenden wird der Ansatz von Gor'kov³ benutzt

$$H_1 = \frac{V}{2} \int \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\underline{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\underline{r}) \psi_{\downarrow}(\underline{r}) \psi_{\uparrow}(\underline{r}) d^3r. \quad (\text{II, 2.1})$$

$\psi_{\sigma}^{\dagger}(\underline{r})$ bzw. $\psi_{\sigma}(\underline{r})$ sind die üblichen Feldoperatoren für die Erzeugung bzw. Vernichtung eines Elektrons mit Spin σ am Ort $\underline{r}$. H_1 beschreibt also die Wechselwirkung, die zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin erfahren, wenn sie am Ort $\underline{r}$ "zusammenkommen". Die Stärke der Wechselwirkung wird durch die Konstante V beschrieben.

Transformation von (II, 2.1) in die tight-binding Darstellung mit Hilfe der Entwicklungen

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma}(\underline{r}) &= \sum_i \phi_i(\underline{r}) c_{i\sigma} \\ \psi_{\sigma}^{\dagger}(\underline{r}) &= \sum_i \phi_i^*(\underline{r}) c_{i\sigma}^{\dagger} \end{aligned} \quad (\text{II, 2.2})$$

liefert

$$H_1 = \sum_{i,n,j,m} V_{injm} c_{i\uparrow}^+ c_{n\downarrow}^+ c_{j\downarrow} c_{m\uparrow} \quad (\text{II, 2.3})$$

mit
$$V_{injm} := \int d^3r \phi_i^*(\underline{r}) \phi_n^*(\underline{r}) \frac{V}{2} \phi_j(\underline{r}) \phi_m(\underline{r}).$$

Im Falle von Supraleitung ist V attraktiv, Elektronen mit entgegengesetzten Spins sind als Cooper-Paare gebunden. Nimmt man an, daß die Wechselwirkung sehr kurzreichweitig ist - für die verhältnismäßig fest gebundenen d-Elektronen ist dies wohl sicherlich der Fall - , so können die Beiträge der Terme mit $i \neq n$ und $j \neq m$ in (II, 2.3) vernachlässigt werden²⁰. Der gesamte Hamiltonian für das Problem lautet dann ($V_{ijjj} := V_{ij}$)

$$H = \sum_{i,\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_{i,j} V_{ij} c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}. \quad (\text{II, 2.4})$$

V_{ij} möge die Coulomb-Abstoßung der Elektronen in der folgenden Weise enthalten

$$V_{ij} = \lambda_{ij} - U_i \delta_{ij}. \quad (\text{II, 2.5})$$

λ_{ij} ist das Matrix-Element für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in der tight-binding Basis, U_i beschreibt die intra-atomare Coulomb Abstoßung.

In der Hartree-Fock-Gor'kov-Approximation³ wird das Produkt der vier Operatoren $c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}$ durch den folgenden Ausdruck ersetzt:

$$\begin{aligned}
 c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} &\approx \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ \rangle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \\
 &+ \langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ \\
 &+ \langle c_{i\uparrow}^+ c_{j\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} \\
 &+ \langle c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^+ c_{j\uparrow} .
 \end{aligned}
 \tag{II, 2.6}$$

$\langle 0 \rangle$ bedeutet den thermodynamischen Mittelwert des Operators 0:

$$\langle 0 \rangle \equiv \text{Sp}(e^{-\beta(H-\mu N)} 0) / \text{Sp} e^{-\beta(H-\mu N)}, \quad \beta = (k_B T)^{-1} \tag{II, 2.7}$$

Für die Supraleitung sind die beiden ersten Terme auf der rechten Seite von (II, 2.6) bedeutsam. Sie beschreiben die Paar-Erzeugung bzw. die Paar-Vernichtung. Die verbleibenden Terme sind für die weitere Betrachtung irrelevant und werden deshalb zunächst vernachlässigt. Für (II, 2.4) folgt damit

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{i,\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i \neq j}} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \\
 \sum_i (\Delta_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \Delta_i c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+)
 \end{aligned}
 \tag{II, 2.8}$$

mit
$$\Delta_i = \sum_j V_{ij} \langle c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle$$

(II, 2.9)

und
$$\Delta_i^+ = \sum_j V_{ji} \langle c_{j\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ \rangle = \Delta_i^* .$$

H in (II, 2.8) kann formal wiederum auf die Gestalt (II, 1.8) gebracht werden. Dazu führt man nach einem Vorschlag von Nambu^{11, 13} Spinoroperatoren ein

$$\underline{\zeta}_i = \begin{pmatrix} c_{i1} \\ c_{i2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \underline{\zeta}_i^+ = (c_{i1}^+, c_{i2}^+) \equiv (c_{i\uparrow}^+, c_{i\downarrow}^+). \quad (\text{II, 2.10})$$

$\underline{\zeta}_i^+$ und $\underline{\zeta}_j$ genügen (komponentenweise) denselben Vertauschungsregeln wie $c_{i\sigma}^+$ und $c_{i\sigma}$

$$\{\underline{\zeta}_i, \underline{\zeta}_j^+\} = \delta_{ij} 1, \quad \{\underline{\zeta}_i, \underline{\zeta}_j\} = \{\underline{\zeta}_i^+, \underline{\zeta}_j^+\} = 0. \quad (\text{II, 2.11})$$

Mit Hilfe dieser Operatoren läßt sich der Hamiltonian (II, 2.8) schreiben in der Form

$$H = \sum_i \underline{\zeta}_i^+ \hat{\epsilon}_i \underline{\zeta}_i + \sum_{i \neq j} \underline{\zeta}_i^+ \hat{t}_{ij} \underline{\zeta}_j + \text{const.} \quad (\text{II, 2.12})$$

$\hat{\epsilon}_i$ und $\hat{t}_{ij}$ sind jetzt (2x2)-Matrizen:

$$\hat{\epsilon}_i = \begin{pmatrix} \epsilon_i & \Delta_i \\ \Delta_i^* & -\epsilon_i \end{pmatrix}, \quad \hat{t}_{ij} = \begin{pmatrix} t_{ij} & 0 \\ 0 & -t_{ij} \end{pmatrix}. \quad (\text{II, 2.13})$$

In der $\underline{c}_i$ -Darstellung nimmt H also die Form eines Ein-Teilchen-Operators an. Die Ein-Teilchen-Greenfunktion

$$\hat{G}_{ij}(t) = -i \langle T \underline{c}_i(t) \underline{c}_j^+(0) \rangle \quad (\text{II, 2.14})$$

ist in dieser Darstellung ebenfalls eine (2x2)-Matrix. T ist der übliche Zeitordnungsoperator. Man findet mit Hilfe von (II, 2.10)

$$\hat{G}_{ij}(t) = \begin{pmatrix} G^{11}(t) & G^{12}(t) \\ G^{21}(t) & G^{22}(t) \end{pmatrix}_{ij} = -i \begin{pmatrix} \langle T c_{i\uparrow}(t) c_{j\uparrow}^+(0) \rangle & \langle T c_{i\uparrow}(t) c_{j\downarrow}(0) \rangle \\ \langle T c_{i\downarrow}^+(t) c_{j\uparrow}^+(0) \rangle & \langle T c_{i\downarrow}^+(t) c_{j\downarrow}(0) \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{II, 2.15})$$

Die Komponenten G^{11}_{ij} bzw. G^{22}_{ij} in der Diagonalen von $\hat{G}_{ij}$ sind nichts anderes als die Greenfunktion für ein Elektron mit Spin aufwärts bzw. die Greenfunktion für ein "Loch" mit Spin abwärts in der Wannier- bzw. tight-binding-Darstellung. Die Komponenten G^{21}_{ij} und G^{12}_{ij} in der Nichtdiagonalen, die sog. anomalen Greenfunktionen³, beschreiben im wesentlichen die Erzeugung und Vernichtung von Teilchenpaaren im betrachteten System. Die Fouriertransformation von $\hat{G}_{ij}(t)$ bzgl. der Zeit t lautet für endliche Temperaturen^{3,13}

$$\hat{G}_{ij}(t) = - \frac{1}{i\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n t} \hat{G}_{ij}(\omega_n) , \quad (\text{II, 2.16})$$

wobei $\omega_n = i\pi(2n+1)/\beta + \mu$. Für den Operator $\hat{G}(\omega_n)$ gilt ganz allgemein die

folgende Bewegungsgleichung¹³

$$(\omega_n \hat{1} - \hat{D} - \hat{W}) \hat{G} = \hat{1} . \quad (\text{II}, 2.17)$$

Dabei ist in der Wannier- oder tight-binding- Darstellung $\hat{D}_{ij} = \hat{\epsilon}_i \delta_{ij}$ und $\hat{W}_{ij} = \hat{t}_{ij}$.

Aus (II, 2.17) leitet man die folgenden wichtigen Symmetrie-Relationen ab (s. Anhang B):

$$G^{22}(\omega_n) = -G^{11}(\omega_n)^+ , \quad G^{21}(\omega_n) = G^{12}(\omega_n)^+ . \quad (\text{II}, 2.18)$$

Die formale Übereinstimmung des Hamiltonian (II, 2.12) mit dem Hamiltonian (II, 1.8) legt es nahe, die Methode der CPA auch auf supraleitende Legierungen anzuwenden. Für den Hamiltonian der konfigurationsgemittelten Legierung macht man daher wie in (II, 1.8) den Ansatz

$$H_{\text{eff}} = \sum_i c_i^\dagger \hat{\Sigma} c_i + \sum_{i \neq j} c_i^\dagger \hat{t}_{ij} c_j . \quad (\text{II}, 2.19)$$

Da H_{eff} translationsinvariant ist, gelten die Relationen (II, 2.18) für die zugehörige "Ein-Teilchen"-Greenfunktion-Matrix. Mit Hilfe von (II, 2.17) erhält man dann sofort, daß $\hat{\Sigma}$ die Form hat

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma & \Delta \\ \Delta^* & -\Sigma^* \end{pmatrix}. \quad (\text{II}, 2.20)$$

Für die zugehörige lokale Greenfunktion findet man damit

$$\hat{G}_{ii}^0(\omega_n) \equiv \hat{F}(\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{(\omega_n - \Sigma - \epsilon_k)(\omega_n + \Sigma^* + \epsilon_k) - |\Delta|^2} \\ \times \begin{pmatrix} \omega_n + \Sigma^* + \epsilon_k & \Delta \\ \Delta^* & \omega_n - \Sigma - \epsilon_k \end{pmatrix}. \quad (\text{II}, 2.21)$$

ϵ_k bezeichnet die räumliche Fouriertransformierte von t_{ij}

$$\epsilon_k = \sum_{j \neq 0} t_{0j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{0j}}. \quad (\text{II}, 2.22)$$

Relativ zu dem durch $\hat{\Sigma}$ charakterisierten effektiven Medium besteht das aktuelle System (der supraleitenden Legierung) aus "Störpotentialen" $\hat{V}_i = \hat{\epsilon}_i - \hat{\Sigma}$ an den einzelnen Gitterplätzen. Die CPA-Bedingung (II, 1.7) fordert, daß im Konfigurationsmittel die (totale) Streuung an einem Störpotential $\hat{V}_i$ (vgl. (II, 1.6.)) verschwindet

$$\langle \hat{T}_i \rangle = \langle [\hat{1} - \hat{V}_i \hat{F}]^{-1} \hat{V}_i \rangle = 0. \quad (\text{II}, 2.23)$$

Gleichung (II, 2.23) ist die zu (II, 1.7) analoge Matrixform der Selbstkonsistenzgleichung. Allerdings kann die Konfigurationsmittelung zunächst

nicht so einfach ausgeführt werden wie in (II, 1.7), da $\hat{V}_i$ über $\hat{\epsilon}_i$ nicht nur von der Konfiguration des i-ten Gitterplatzes sondern wegen (II, 2.9) von der Konfiguration aller übrigen Gitterplätze $j \neq i$ abhängt. Für $T \rightarrow T_c$ kann man jedoch in (II, 2.23) alle Terme von höherer Ordnung in Δ_i wegen $\frac{\Delta_i}{\epsilon_i} \sim \frac{T_c}{T_F} \sim 10^{-3}$ (T_F Fermi-Temperatur) vernachlässigen. Für den Fall daß Δ_i höchstens linear in (II, 2.23) auftritt, kann die Konfigurationsmittelung über alle $j \neq i$ zuerst ausgeführt werden, so daß in (II, 2.23) nur noch eine Mittelung über i übrig bleibt.

Wir ersetzendaher in (II, 2.23) Δ_i durch $\langle \Delta_i \rangle_i$ und nehmen nur Terme mit, die linear in diesem Parameter sind. $\langle \dots \rangle_i$ soll die Konfigurationsmittelung über alle Gitterplätze $j \neq i$ andeuten. Es folgt dann wie in (II, 1.17)

$$x [\hat{I} - \hat{V}_A \hat{F}]^{-1} \hat{V}_A + (1-x) [\hat{I} - \hat{V}_B \hat{F}]^{-1} \hat{V}_B = 0 \quad (\text{II, 2.27})$$

$$\text{mit } \hat{V}_{A(B)} = \begin{pmatrix} \epsilon_{A(B)} - \Sigma & \Delta_{A(B)} - \Delta \\ \Delta_{A(B)}^* - \Delta^* & -(\epsilon_{A(B)} - \Sigma^*) \end{pmatrix}$$

$$\text{und } \Delta_{A(B)} \equiv \langle \Delta_i \rangle_{i = A, B}$$

Unter Beachtung der Regeln für die Matrizenmultiplikation findet man nach einigen algebraischen Umformungen eine "Soven"-Form für die Selbstkonsistenzgleichung (II, 2.24)

$$\hat{\Sigma}(\omega_n) = x \hat{\epsilon}_A + y \hat{\epsilon}_B - (\hat{\epsilon}_A - \hat{\Sigma}(\omega_n)) \hat{F}(\omega_n) (\hat{\epsilon}_B - \hat{\Sigma}(\omega_n)). \quad (\text{II, 2.25})$$

Diese Matrixgleichung ersetzt die Gleichung (II, 1 18) im Fall einer supra-leitenden Legierung und legt die vier noch unbestimmten Parameter $\text{Re}\Sigma$, $\text{Im}\Sigma$, $\text{Re}\Delta$ und $\text{Im}\Delta$ fest.

Im folgenden interessiert in erster Linie die supraleitende Sprungtemperatur T_c der Legierung. Wir bestimmen sie aus den Selbstkonsistenzgleichungen für Δ , Δ_A und Δ_B . Die Definitionsgleichung (II, 2.9) für Δ_i läßt sich mit Hilfe von (II, 2.15) und (II, 2.16) in der Form

$$\Delta_i = \sum_j V_{ij} G_{jj}^{12}(0^+) = -\frac{1}{\beta} \sum_j \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_{ij} G_{jj}^{12}(\omega_n) \quad (\text{II, 2.26})$$

schreiben. $G_{jj}^{12}(0^+)$ ist eine abkürzende Schreibweise für $\lim_{t \rightarrow 0^+} G_{jj}^{12}(t)$.

Mittelt man jetzt über die Konfiguration aller Gitterplätze $j \neq i$, so folgt

$$\langle \Delta_i \rangle_i = -\frac{1}{\beta} \sum_j \sum_n \langle V_{ij} G_{jj}^{12}(\omega_n) \rangle_i. \quad (\text{II, 2.27})$$

In der tight-binding-Näherung werden in der Summe über $j \neq i$ nur Beiträge von nächsten Nachbarn von i mitgenommen. Anstelle des unhandlichen und komplizierten Ausdruckes (II, 2.27) erhält man dann näherungsweise

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta_1 \rangle_1 \simeq & -\frac{1}{\beta} \sum_n \left\{ V_{11} \langle G_{11}^{12}(\omega_n) \rangle_1 \right. \\
 & + n_A V_{12_A} \langle G_{22}^{12}(\omega_n) \rangle_{2=A} \\
 & \left. + n_B V_{12_B} \langle G_{22}^{12}(\omega_n) \rangle_{2=B} \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{II, 2.28}$$

2_A bezeichnet irgendeinen festen Gitterplatz 2, der zum Platz 1 nächstbenachbart ist und mit einem A-Atom besetzt ist. n_A ist die mittlere Anzahl der zum Platz 1 nächstbenachbarten A-Atome. Wir setzen

$$n_A = x z, \quad n_B = y z. \tag{II, 2.29}$$

z ist die Koordinationszahl des Gitters.

Die über alle Gitterplätze $j \neq i$ gemittelte lokale Matrix-Greenfunktion wird mit $\langle \hat{G}_{ij} \rangle_i$ bezeichnet. Man findet (s. Anhang A)

$$\langle \hat{G}_{ij} \rangle_i = \hat{F} + \hat{F} \hat{T}_i \hat{F} \tag{II, 2.30}$$

mit dem lokalen Streuoperator

$$\hat{T}_i = (\hat{f} - \hat{V}_i \hat{F})^{-1} \hat{V}_i.$$

Setzt man diesen Ausdruck für $\hat{T}_i$ in (II, 2.30) ein, so folgt

$$\langle \hat{G}_{ij} \rangle_i = (\hat{F}^{-1} - \hat{V}_i)^{-1}. \tag{II, 2.31}$$

Man sieht leicht ein, daß in (II, 2.28) $\langle G_{22}^{12} \rangle_2$ durch $\langle G_{11}^{12} \rangle_1$ ersetzt werden kann, so daß man schließlich die Gleichungen

$$\Delta_A = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{ f_{AA} \langle G_{11}^{12}(\omega_n) \rangle_{1=A} + f_{AB} \langle G_{11}^{12}(\omega_n) \rangle_{1=B} \} \quad (\text{II, 2.32})$$

und

$$\Delta_B = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{ f_{BB} \langle G_{11}^{12}(\omega_n) \rangle_{1=B} + f_{BA} \langle G_{11}^{12}(\omega_n) \rangle_{1=A} \} \quad (\text{II, 2.33})$$

erhält. Hier sind

$$\begin{aligned} f_{AA} &\equiv V_{1A1A} + n_A V_{1A2A} \\ f_{BB} &\equiv V_{1B1B} + n_B V_{1B2B} \\ f_{AB} &\equiv n_B V_{1A2B}, \quad f_{BA} \equiv n_A V_{1B2A} \end{aligned} \quad (\text{II, 2.34})$$

Die Greenfunktion $\langle G_{ii}^{12}(\omega_n) \rangle_i$ kann man mit Hilfe von (II, 2.31) durch $\langle \Delta_i \rangle_i$, $F^{12}(\omega_n)$ und $\Delta(\omega_n)$ ausdrücken.

Für die gemittelte anomale Greenfunktion $F^{12}(\omega_n)$ gilt die Relation

$$F^{12}(\omega_n) = \frac{i/m F''(\omega_n)}{\omega_n - i/m \Sigma(\omega_n)} \Delta(\omega_n) \equiv g(\omega_n) \Delta(\omega_n), \quad (\text{II, 2.35})$$

die man sehr einfach aus (II, 2.21) gewinnt. Damit wird

$$\langle G_{ij}^{12}(\omega_n) \rangle_i = a_i(\omega_n) \Delta(\omega_n) + b_i(\omega_n) \langle \Delta_i \rangle_i, \quad (\text{II, 2.36})$$

wobei für a_i und b_i unter Vernachlässigung von nichtlinearen Beiträgen in

Δ die Beziehungen

$$a_i(\omega_n) = \frac{g(\omega_n) / |F''(\omega_n)|^2 - 1}{|[F''(\omega_n)]^{-1} - (\varepsilon_i - \Sigma(\omega_n))|^2} \quad (\text{II, 2.37})$$

und

$$b_i(\omega_n) = \frac{1}{|[F''(\omega_n)]^{-1} - (\varepsilon_i - \Sigma(\omega_n))|^2} \quad (\text{II, 2.38})$$

folgen. a_i und b_i lassen sich also einfach berechnen, wenn man F^{11} und Σ kennt. Für eine supraleitende Legierung müssen F^{11} und Σ im Prinzip aus der (1,1)-Komponente von (II, 2.25) bestimmt werden. Für $T \rightarrow T_c$ geht diese Gleichung jedoch in die übliche CPA-Gleichung (II, 1.18) für normalleitende Legierungen über und kann auf die übliche Weise gelöst werden^{12,14,15}.

Die Selbstkonsistenzgleichungen (II, 2.32 und 33) lassen sich damit umschreiben auf die Form

$$\begin{aligned} \Delta_A = & -\frac{1}{\beta} (r_{AA} + r_{AB}) \sum_n (a_A(\omega_n) + a_B(\omega_n)) \Delta(\omega_n) \\ & -\frac{1}{\beta} r_{AA} \sum_n b_A(\omega_n) \Delta_A \\ & -\frac{1}{\beta} r_{AB} \sum_n b_B(\omega_n) \Delta_B \end{aligned} \quad (\text{II, 2.39 a})$$

und

$$\begin{aligned} \Delta_B = & -\frac{1}{\beta} (\tilde{r}_{BB} + r_{BA}) \sum_n (a_B(\omega_n) + a_A(\omega_n)) \Delta(\omega_n) \\ & -\frac{1}{\beta} \tilde{r}_{BB} \sum_n b_B(\omega_n) \Delta_B \\ & -\frac{1}{\beta} \tilde{r}_{BA} \sum_n b_A(\omega_n) \Delta_A \end{aligned} \quad (\text{II, 2.39 b})$$

Dies ist ein Gleichungssystem zur Bestimmung von Δ_A und Δ_B als Funktionen von ω . Als Lösungen findet man

$$\Delta_A = -\frac{1}{\beta} \sum_n \chi_A(\omega_n) \Delta(\omega_n) \quad (\text{II, 2.40 a})$$

und

$$\Delta_B = -\frac{1}{\beta} \sum_n \chi_B(\omega_n) \Delta(\omega_n) \quad (\text{II, 2.40 b})$$

Es bleibt nun noch zu zeigen, daß

$$\begin{aligned} \chi_X(\omega_n) = & \frac{1}{C} \left\{ \left[1 + \frac{1}{\beta} \tilde{r}_{YY} \sum_n b_Y(\omega_n) \right] [\tilde{r}_{XX} a_X(\omega_n) + \tilde{r}_{XY} a_Y(\omega_n)] \right. \\ & \left. - \left[\tilde{r}_{YX} \frac{1}{\beta} \sum_n b_X(\omega_n) \right] [\tilde{r}_{YY} a_Y(\omega_n) + \tilde{r}_{YX} a_X(\omega_n)] \right\} \end{aligned}$$

$$X, Y = A, B, \quad X \neq Y$$

(II, 2.41)

Wobei

$$C \equiv \left[1 + \gamma_{AA} \frac{1}{\beta} \sum_n \varepsilon_A(\omega_n) \right] \left[1 + \gamma_{BB} \frac{1}{\beta} \sum_n \varepsilon_B(\omega_n) \right] \\ - \left[\gamma_{BA} \frac{1}{\beta} \sum_n b_A(\omega_n) \right] \left[\gamma_{AB} \frac{1}{\beta} \sum_n b_B(\omega_n) \right]. \quad (II, 2.42)$$

Die Selbstkonsistenzgleichung für $L' = \rho$, erhält man aus der (1,2)-Komponente von (II, 2.25). Man findet für $T = T_c$ (s. Ansatz C)

$$L(\omega_n) = \frac{\omega_n - i/m \Sigma(\omega_n)}{\omega_n} \cdot (x L_A - y L_B) \\ - \frac{m [\bar{F}''(\omega_n) \Sigma(\omega_n)] + (x \varepsilon_A + y \varepsilon_B) / m \bar{F}''(\omega_n)}{(\varepsilon_A - \varepsilon_B) / m \bar{F}''(\omega_n)} \\ \cdot (L_A - L_B) \quad (II, 2.43)$$

Man schreibt diese Gleichung in der Form

$$L(\omega_n) = \bar{L}_D(\omega_n) L'(\omega_n)$$

mit

$$\omega_n \bar{L}_D(\omega_n) = \omega_n - i/m \bar{L}(\omega_n)$$

$\bar{L}_D = 0$ wäre gleich 0, wenn $\varepsilon_A = \varepsilon_B$ und kann als eine Renormalisierung der Frequenzen der Ein-Teilchen-Interaktionen interpretiert werden. Diese Renormalisierung ist ein typischer "Dimeren"-Effekt. Es findet daher keine effektive Wechselwirkung statt. Für die Periode der Legierung ist die Dimeren

Strong-coupling-Supraleitung^{13,21} die Größe

$$\Delta'(\omega_n) = \Delta(\omega_n) / \mathcal{I}_D(\omega_n) \quad (\text{II, 2.44})$$

zu definieren. Physikalisch relevant ist natürlich nur der Parameter $\Delta'(\omega)$, den man aus (II, 2.44) durch analytische Fortsetzung auf die reelle ω -Achse erhält. $\Delta'(\omega)$ ist von Null verschieden im Bereich $-\omega_D \leq \omega \leq +\omega_D$, und kann dort wegen $\frac{\omega_D}{E_F} \sim 10^{-3}$ durch den Wert an der Fermikante E_F (bzw. $\omega=0$) ersetzt werden. [†])

$$\Delta'(\omega) \longrightarrow \Delta'(\omega=0) \equiv \Delta_0 = \text{konst.}$$

ω_D ist ein "cut-off"-Parameter von der Größenordnung der Debye-Energie der Legierung. Es folgt

$$\Delta_0 = (x + \xi) \Delta_A + (y - \xi) \Delta_B \quad (\text{II, 2.45})$$

wobei

$$\xi = \frac{\text{Im}(F''(0+i\delta) \Sigma(0)) - (x\varepsilon_A + y\varepsilon_B) \text{Im} F''(0+i\delta)}{(\varepsilon_A - \varepsilon_B) \text{Im} F''(0+i\delta)} \quad (\text{II, 2.46})$$

Setzt man (II, 2.40) in (II, 2.45) ein, so erhält man eine relativ einfache

[†]) E_F ist gegen E_Γ gemessen

Bestimmungsgleichung für T_c der Legierung:

$$1 = - \frac{1}{\beta_c} \sum_n \left\{ [(x+y) \chi_A(\omega_n) + (y-x) \chi_B(\omega_n)] \cdot Z_D(\omega_n) \right\} \quad (\text{II, 2.47})$$

Diese Gleichung läßt sich sofort auf die übliche Weise nach T_c auflösen, wenn man $G_{ij}^{12}(\omega_n)$ in nullter Näherung durch $F^{12}(\omega_n)$ approximiert (vgl. II, 2.30). Es wird dann

$$a_i(\omega_n) \approx \frac{i/m F''(\omega_n)}{\omega_n - i/m \Sigma(\omega_n)}, \quad b_i(\omega_n) \approx 0 \quad (\text{II, 2.48})$$

woraus

$$\chi_A(\omega_n) \approx (\gamma_{AA} + \gamma_{AB}) \frac{i/m F''(\omega_n)}{\omega_n - i/m \Sigma(\omega_n)} \quad (\text{II, 2.49a})$$

und

$$\chi_B(\omega_n) \approx (\gamma_{BB} + \gamma_{BA}) \frac{i/m F''(\omega_n)}{\omega_n - i/m \Sigma(\omega_n)} \quad (\text{II, 2.49b})$$

folgt. Die Sprungtemperatur T_c berechnet sich dann aus der Formel

$$T_c = 1.13 \omega_D \exp \left\{ - \frac{1}{\lambda_{\text{eff}} N(0)} \right\}. \quad (\text{II, 2.50})$$

$N(0)$ ist die elektronische Zustandsdichte der (normalleitenden) Legierung an der Fermikante und λ_{eff} eine effektive Elektron-Phonon-Wechselwirkungskonstante für die konfigurationsgemittelte Legierung. Es ist

$$\lambda_{\text{eff}} = (x - \xi)(\gamma_{AA} + \gamma_{AB}) + (y + \xi)(\gamma_{BB} + \gamma_{BA}). \quad (\text{II}, 2.51)$$

Diese Gleichung für λ_{eff} ist das Resultat einer sicherlich recht groben Näherung, dennoch erhält man ein nichttriviales Ergebnis. Auch die Grenzfälle werden von (II, 2.51) richtig wiedergegeben. Vernachlässigt man z.B. die Konfigurationsabhängigkeit der Kopplungskonstanten, so folgt offensichtlich $\lambda_{\text{eff}} = \lambda_A = \lambda_B$. Der "Unordnungseffekt" ist dann allein in der Zustandsdichte $N(0)$ enthalten in Übereinstimmung mit Andersons Theorem^{6,7}. Einen weiteren Grenzfall erhält man für $\epsilon_A \rightarrow \epsilon_B$ ("weak-scattering"). In diesem Fall wird (vgl. II, 1.19)

$$\Sigma(\omega) \simeq \text{Re } \Sigma(\omega) \simeq x\epsilon_A + y\epsilon_B,$$

d.h. der Parameter ξ verschwindet. Die effektive Elektron-Phonon-Kopplungskonstante wird dann einfach

$$\lambda_{\text{eff}} = x(\gamma_{AA} + \gamma_{AB}) + y(\gamma_{BB} + \gamma_{BA}).$$

Liegen die Energieniveaus ϵ_j des A-Metalls und des B-Metalls sehr weit auseinander ("split-band" limit), so ist $\gamma_{AB} \approx 0 \approx \gamma_{BA}$ und λ_{eff} läßt sich als Summe eines reinen A-Beitrages und eines reinen B-Beitrages schreiben. Man beachte jedoch, daß $\gamma_{AA} \neq \lambda_A$ und $\gamma_{BB} \neq \lambda_B$ ist.

Im allgemeinen werden x_A und x_B in komplizierter Weise von ω_n abhängen, als es in der Näherung (II, 2.49) der Fall ist, so daß es schwieriger wird, eine Lösung für (II, 2.47) zu finden, aus der man die Sprungtemperatur T_C und die effektive Elektron-Phonon-Kopplungskonstante

λ_{eff} der Legierung bestimmen kann. Prinzipiell ergibt sich in der Methode jedoch nichts Neues. Wir wollen uns daher nicht weiter mit der BSC-Formulierung der Theorie beschäftigen, sondern uns der Verallgemeinerung auf die Strong-coupling-Supraleitung in Legierungen zuwenden.

(3) Anwendung der CPA auf die Eliashberg-Theorie der Strong-coupling-Supraleitung in Legierungen

Supraleitende Systeme mit starker Elektron-Phonon-Wechselwirkung (d-Band Superleiter) werden mit der BCS-Theorie nicht korrekt beschrieben. Grund dafür ist, daß die Lebensdauer der beteiligten elektronischen Zustände mit der Lebensdauer des ausgetauschten virtuellen Phonons (siehe Fig.3) vergleichbar wird, so daß man Retardierungseffekte nicht mehr vernachlässigen kann.



Fig. 3
Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch Austausch eines virtuellen Phonons

In diesem Abschnitt wird daher die CPA auf Legierungen erweitert, die zu den Eliashberg-Supraleitern¹¹ gehören.

Wir betrachten den folgenden Modell Hamiltonian, der anders als der Hamiltonian (II, 2.8) die Gitterschwingungen explizit enthält

$$H = \sum_{i,\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} \langle 1/u_i \cdot p V_j / j \rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \quad (II, 3.1)$$

ϵ_i und t_{ij} ist das atomare Energieniveau und das Hopping-Integral für das Gitter in seiner Gleichgewichtslage; die Verschiebung des i-ten Gitteratoms aus seiner Ruhelage $\underline{r}_{i0}$ wird mit $\underline{u}_i$ bezeichnet, $V_i = V_i(\underline{r} - \underline{r}_i)$ ist das

effektive Ionenpotential des i-ten Gitterions ($\underline{r}_i = \underline{r}_{i0} + \underline{u}_i$). Das Matrixelement $\langle i | \underline{u}_1 \cdot \nabla V_1 | j \rangle$ beschreibt daher einen elektronischen Übergang aus dem Wannier-Zustand $|j\rangle$ in den Wannier-Zustand $|i\rangle$, der durch eine Schwingung des l-ten Gitteratoms verursacht wird.

Für die Einteilchen-(Matrix-) Greenfunktion $\hat{G}$ gilt wiederum die Bewegungsgleichung (vgl. II, 2.17)

$$(\omega_n \hat{1} - \hat{D} - \hat{W}) \hat{G} = \hat{1} \quad (\text{II, 3.2})$$

Allerdings ist jetzt

$$\begin{aligned} \hat{D}_{ij}(\omega_n) &= (\hat{\epsilon}_i + \hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n)) \delta_{ij} \\ \hat{W}_{ij}(\omega_n) &= (\hat{t}_{ij} + \hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n)) (1 - \delta_{ij}) \end{aligned} \quad (\text{II, 3.3})$$

Hier ist anders als in (II, 2.13) $\hat{\epsilon}_i = \begin{pmatrix} \epsilon_i & 0 \\ 0 & -\epsilon_i \end{pmatrix}$, während $\hat{t}_{ij}$ wie in (II, 2.13) definiert ist. Die Selbstenergiematrix $\hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n)$ setzt sich aus einem Phonon-Anteil $\hat{\Sigma}_{ij}^{ph}$ und einem Coulomb-Anteil $\hat{\Sigma}_{ij}^c$ zusammen

$$\hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n) = \hat{\Sigma}_{ij}^{ph}(\omega_n) + \hat{\Sigma}_{ij}^c(\omega_n) \quad (\text{II, 3.4})$$

$\hat{\Sigma}_{ij}^{ph}(\omega_n)$ und $\hat{\Sigma}_{ij}^c(\omega_n)$ werden aus den bekannten Selbstenergie-Graphen nach den üblichen Diagramm-Regeln berechnet³.

Da

$$\sum_{ij}^{22}(\omega_n) = -\sum_{ij}^{22}(-\omega_n) =$$

$$+ \text{diagram with dashed lines and crosses}$$

erhält man

$$\sum_{ij}^H(\omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \ell, \ell' \\ s', s, m}} \langle i | \nabla_\beta V_\ell | s' \rangle \langle s | \nabla_\alpha V_\ell | j \rangle D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega_n - \omega_m) G_{s's}^H(\omega_m)$$

$$- \frac{1}{\beta} \sum_{s, s', m} \langle i, s | U(\omega_n - \omega_m) | s', j \rangle G_{s's}^H(\omega_m).$$

(II, 3.5 a)

Entsprechend ergibt sich aus

$$\sum_{ij}^{12}(\omega_n) =$$

der Ausdruck

$$\sum_{ij}^{12}(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \ell, \ell' \\ s', s, m}} \langle s' | \nabla_\beta V_\ell | i \rangle \langle s | \nabla_\alpha V_\ell | j \rangle D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega_n - \omega_m) G_{s's}^{12}(\omega_m)$$

$$+ \frac{1}{\beta} \sum_{s', s, m} \langle s', s | U(\omega_n - \omega_m) | i, j \rangle G_{s's}^{12}(\omega_m).$$

(II, 3.5 b)

Schließlich erhält man aus

$$\Sigma_{ij}^{21}(\omega_n) =$$

den Ausdruck

$$\Sigma_{ij}^{21}(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\substack{\alpha, \beta, l, l', \\ s, s', m}} \langle i | \nabla_\beta V_{l'} | s' \rangle \langle j | \nabla_\alpha V_l | s \rangle D_{\alpha\beta}(l, l', \omega_n - \omega_m) G_{s's}^{21}(\omega_m) \\ + \frac{1}{\beta} \sum_{s, s', m} \langle i, j | U(\omega_n - \omega_m) | s' s \rangle G_{s's}^{21}(\omega_m) .$$

(II, 3.5 c)

Die geschlängelte Wechselwirkungslinie in den Selbstenergie-Graphen veranschaulicht die Fouriertransformierte der Greenfunktion für Gitterschwingungen

$$D_{\alpha\beta}(l, l', \omega_n) = \int_0^{-i\beta} dt e^{i\omega_n t} D_{\alpha\beta}(l, l', t) \quad (\text{II, 3.6})$$

mit

$$D_{\alpha\beta}(l, l', t) = -i \langle T u_x^\alpha(t) u_{x'}^\beta(0) \rangle . \quad (\text{II, 3.7})$$

u_1^α bezeichnet die α -te kartesische Komponente des Verschiebungsvektors $\underline{u}_1$. Die effektive Coulomb-Wechselwirkung U zwischen den Elektronen wird durch eine gestrichelte Linie dargestellt, das Matrixelement in der Wannier-Darstellung ist durch

$$\langle n_1' n_2' | U | n_1 n_2 \rangle = \int d^3r \int d^3r' w_{n_1'}(\underline{r}) w_{n_2'}(\underline{r}') U(\underline{r} - \underline{r}') w_{n_2}(\underline{r}') w_{n_1}(\underline{r})$$

(II, 3.8)

gegeben. Man überzeugt sich leicht davon, daß man für ein reines Metall durch Transformation von (II, 3.5 - 3.7) in die Bloch-Darstellung den bekannten Ausdruck^{13, 21}

$$\hat{\Sigma}(\underline{k}, \omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{m, k'} \left[\left\{ \sum_{\lambda} |g_{\underline{k} \underline{k}' \lambda}|^2 D_{\lambda}(\underline{k} - \underline{k}', \omega_n - \omega_m) \right\} + U(\underline{k} - \underline{k}', \omega_n - \omega_m) \right] \hat{t}_2 \hat{G}(\underline{k}', \omega_m) \hat{t}_3$$

(II, 3.9)

für die Selbstenergie zurückerhält.

In der Legierung sind im allgemeinen $\hat{\epsilon}_{ij}$, $\hat{t}_{ij}$ und $\hat{\Sigma}_{ij}$ konfigurationsabhängig. $\hat{\Sigma}_{ij}$ hängt dabei nicht nur von der Konfiguration der Gitterplätze i und j ab, sondern wegen (II, 3.5) auch von der Konfiguration aller übrigen Plätze. Im Prinzip hätten wir jetzt das allgemeine Streuproblem

$\hat{G} = \hat{G}^0 + \hat{G}^0 \hat{T} \hat{G}^0$ (vgl. II, 1.3) mit $\langle \hat{T} \rangle = 0$ zu lösen. Dieses Verfahren ist jedoch viel zu aufwendig um es explizit durchzuführen. Wir versuchen deshalb das Problem analog zur BCS-Formulierung auf ein "single-site" - Streuproblem zu reduzieren, um die CPA anwenden zu können. Die Aufgabe wird dadurch vereinfacht, daß die Elektron-Phonon-Wechselwirkung zwar zeitlich retardiert jedoch räumlich lokalisiert ist. Man kann dies etwa folgendermaßen einsehen: Die Lebensdauer des virtuellen Phonons verhält sich wie $\frac{1}{\omega_D}$, wobei ω_D die Debye-Frequenz ist (typischer Wert für Übergangsmetalle $\omega_D \sim 300$ °K). Das Phonon breitet sich mit Schallgeschwindigkeit $v_s \sim 5 \cdot 10^5$ cm/sec aus, so daß es innerhalb eines begrenzten räumlichen Bereiches mit einem Durchmesser von etwa $\tau \cdot v_s \sim 10$ Å von einem Elektron emittiert und absorbiert wird. (τ ist die Lebensdauer des elektronischen Zustandes)

Der Hauptbeitrag zur Coulomb-Wechselwirkung rührt wegen der starken Lokalisierung der Elektronen und der großen Abschirmung des Coulomb-Potentials sicherlich von der intraatomaren Wechselwirkung her. Langreichweitige Austauscheffekte werden vernachlässigt.

Nimmt man wiederum an, daß die legierten Metalle ungefähr gleiche Bandbreite besitzen, so kann man folgende Näherungen machen:

- (1) Die Konfigurationsabhängigkeit des Hopping-Integrals t_{ij} wird vernachlässigt.
- (2) Die nichtlokalen Beiträge in der Selbstenergie-Matrix $\hat{\Sigma}_{ij}(\omega)$, d.h. die Terme mit $i \neq j$, werden gegen den lokalen Term mit $i = j$ vernachlässigt.

$\hat{\Sigma}_{ii}(\omega)$ ist sicherlich der dominierende Term. im allgemeinen muß man aber damit rechnen, daß mindestens auch Beiträge von $\hat{\Sigma}_{ij}$ eine Rolle

spielen, wo j ein nächster Nachbarplatz zum Gitterplatz i ist. Um diese Beiträge in der Legierung explizit mitnehmen zu können, muß die CPA jedoch auf konfigurationsabhängige Hopping-Integrale erweitert werden. Diese Erweiterung ist im Anhang A beschrieben.

Mit den Approximationen (1) und (2) erhält man formal wiederum ein lokales Problem, das im Rahmen der im Abschnitt (2) verallgemeinerten CPA behandelt werden kann. Es ist zweckmäßig, alle Matrix-Größen nach den Pauli'schen Spinmatrizen

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

zu entwickeln. Man erhält

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n) &= \mathcal{F}_i(\omega_n) \hat{1} + \phi_i(\omega_n) \hat{\tau}_i; \\ \mathcal{F}_i(\omega_n) &\equiv (1 - \mathcal{Z}_i(\omega_n)) \omega_n. \end{aligned} \quad (\text{II, 3.6})$$

$Z_i^{\text{ph}}(\omega_n)$ ist der (lokale) Coulomb-renormalisierte Elektron-Phonon-Renormalisierungsparameter, $\phi_i(\omega_n) = \phi_i^{\text{ph}}(\omega_n) + \phi_i^{\text{C}}(\omega_n)$ ist die Cooper-Paar-Selbstenergie, sie besitzt einen Elektron-Phonon- und einen Coulomb-Anteil. Die $\hat{\tau}_3$ -Komponente von $\hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n)$ wird nicht explizit hingeschrieben, da sie nach analytischer Fortsetzung auf die reelle ω -Achse in die Definitionen von ε_j einbezogen werden kann. Die Paar-Phase wird wie üblich so gewählt, daß die $\hat{\tau}_2$ -Komponente verschwindet^{13,21}.

Die lokale Matrix-Green-Funktion $\hat{F}$ für die gemittelte supraleitende Legierung definieren wir durch

$$\begin{aligned}\hat{F}(\omega_n) &= \langle \hat{G}_{ii}(\omega_n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_K \langle [(\omega_n - \xi_i(\omega_n))\hat{1} - \phi_i(\omega_n)\hat{\tau}_1 - (\varepsilon_i + \varepsilon_K)\hat{\tau}_3]^{-1} \rangle \\ &\equiv \frac{1}{N} \sum_K [(\omega_n - \xi(\omega_n))\hat{1} - \phi(\omega_n)\hat{\tau}_1 - \hat{\Sigma}_{CPA}(\omega_n) - \varepsilon_K\hat{\tau}_3]^{-1}.\end{aligned}\quad (\text{II, 3.7})$$

Für verschwindende Renormalisierung $\hat{\Sigma}_{ii}$ geht $\hat{F}(\omega_n)$ über in

$$\hat{F}_0(\omega_n) = \begin{pmatrix} F_0(\omega_n) & 0 \\ 0 & -F_0^*(\omega_n) \end{pmatrix}. \quad (\text{II, 3.8})$$

$F_0(\omega)$ ist mit der konfigurationsgemittelten lokalen Green-Funktion (II, 1.15) für die normalleitende Legierung identisch. Daraus ergibt sich für die Selbstenergie-Matrix $\hat{\Sigma}_{CPA}$ der Ausdruck

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_{CPA}(\omega_n) &= \begin{pmatrix} \Sigma_{CPA}(\omega_n) & 0 \\ 0 & -\Sigma_{CPA}^*(\omega_n) \end{pmatrix} \quad (\text{II, 3.9}) \\ &\equiv i\sigma_0(\omega_n)\hat{1} + \sigma_3(\omega_n)\hat{\tau}_3\end{aligned}$$

mit $\sigma_0 \equiv \text{Im } \Sigma_{CPA}$ und $\sigma_3 \equiv \text{Re } \Sigma_{CPA}$.

Die Selbstenergie Σ_{CPA} genügt der üblichen CPA-Gleichung (II, 1.18).

Die Green-Funktion $\hat{F}(\omega_n)$ schreiben wir in der Form

$$\hat{F}(\omega_n) = (\omega_n - \xi - i\sigma_0) B_1 \hat{1} + \phi B_1 \hat{\tau}_1 + B_2 \hat{\tau}_3. \quad (\text{II}, 3.10)$$

Hier ist

$$B_1(\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_K \frac{1}{(\omega_n - \xi - i\sigma_0 - \varepsilon_K - \sigma_3)(\omega_n - \xi - i\sigma_0 + \varepsilon_K + \sigma_3) - \phi^2} \quad (\text{II}, 3.11)$$

und

$$B_2(\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_K \frac{\varepsilon_K + \sigma_3}{(\omega_n - \xi - i\sigma_0 - \varepsilon_K - \sigma_3)(\omega_n - \xi - i\sigma_0 + \varepsilon_K + \sigma_3) - \phi^2} \quad (\text{II}, 3.12)$$

Durch die Gleichung (II, 3.7) wird eine mittlere Renormalisierung

$$\hat{\Sigma}_{\text{ren}}(\omega_n) = \xi(\omega_n) \hat{1} + \phi(\omega_n) \hat{\tau}_1 \quad (\text{II}, 3.13)$$

definiert, die analog zu (II, 2.23) aus der Bedingung

$$\langle \hat{T}_i \rangle = \langle [\hat{I} - \hat{V}_i \hat{F}]^{-1} \hat{V}_i \rangle = 0 \quad (\text{II, 3.14})$$

bestimmt wird. Dabei ist

$$\hat{V}_i = (\varepsilon_i \hat{c}_i + \hat{\Sigma}_{ii}) - (\hat{\Sigma}_{CPA} + \hat{\Sigma}_{ren}) \quad (\text{II, 3.15})$$

(II, 3.14) enthält die Konfigurationsmittelungen nicht nur über den Gitterplatz i sondern wegen (II, 3.5) über alle übrigen Gitterplätze. Es ist jedoch $\frac{(1 - Z_i^{ph})\omega}{\varepsilon_i} \sim \frac{\omega_D}{E_F} \sim 10^{-3}$. (E_F = Fermienergie). Ferner verschwindet δ_i für $T \rightarrow T_C$, so daß wir uns in diesem Fall wiederum auf lineare Terme in den Renormalisierungsenergien beschränken können. Die Konfigurationsmittelung über alle Plätze $j \neq i$ in (II, 3.14) kann dann zuerst ausgeführt, d.h. $\hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n)$ durch $\langle \hat{\Sigma}_{ij}(\omega_n) \rangle_i$ ersetzt werden. Es bleibt dann nur noch eine Mittelung über den i -ten Gitterplatz übrig.

Die resultierende Matrix-Selbstkonsistenzgleichung lautet

$$x [\hat{I} - \hat{V}_A \hat{F}]^{-1} \hat{V}_A + y [\hat{I} - \hat{V}_B \hat{F}]^{-1} \hat{V}_B = 0 \quad (\text{II, 3.16})$$

oder in einer dazu äquivalenten Schreibweise (s. Anhang A)

$$x \langle \hat{G}_{ij} \rangle_{i=A} + y \langle \hat{G}_{ij} \rangle_{i=B} = \hat{F} \quad (\text{II, 3.17})$$

mit

$$\langle \hat{G}_{ij} \rangle_i = [\hat{F}^{-1} - \hat{V}_i]^{-1} \quad (\text{II, 3.18})$$

Um aus (II, 3.16) bzw. (II, 3.17) eine Lösung für $\hat{\Sigma}_{\text{ren}}(\omega_n)$ zu finden, bestimmen wir zunächst $\hat{F} = \hat{F}[\hat{\Sigma}_{\text{ren}}]$ mit Hilfe der Relationen (II, 1.15) und (II, 1.19). Dabei nehmen wir einfachheitshalber eine Lorentzform für die Zustandsdichte $\rho^{(0)} \text{ an}^{24}$:

$$\rho^{(0)}(\varepsilon) = \frac{D}{\pi} \frac{1}{D^2 + \varepsilon^2} \quad (\text{II, 3.19})$$

Man erhält damit

$$\begin{aligned} B_1(\omega_n) &= - \frac{D}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon^2 + D^2)(\varepsilon + \sigma_3 - \sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2})(\varepsilon + \sigma_3 + \sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2})} \\ &= \frac{iD + S\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2}}{S\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2} \{ (iD + S\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2})^2 - \sigma_3^2 \}} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 B_2(\omega_n) &= -\frac{D}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\varepsilon + \sigma_3) d\varepsilon}{(\varepsilon^2 + D^2)(\varepsilon + \sigma_3 - \sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2})(\varepsilon + \sigma_3 + \sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2})} \\
 &= \frac{\sigma_3}{(iD + S\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2})^2 - \sigma_3^2} .
 \end{aligned}$$

(II, 3.21)

Hier wurden die Abkürzungen

$$\begin{aligned}
 \tilde{\omega}_n &\equiv \omega_n - i\sigma_0(\omega_n) - \xi(\omega_n) \\
 S &\equiv \text{sign } \text{Im} \sqrt{\tilde{\omega}_n^2 - \phi^2}
 \end{aligned}$$

(II, 3.22)

verwendet. Das Vorzeichen der Wurzel ist dabei stets positiv zu nehmen. Die Gleichung für $\langle G_{ij} \rangle_i$ wird damit für $T \rightarrow T_c$ (d.h. $\phi^2 \approx 0$) verhältnismäßig einfach. Man findet

$$\langle G_{ii}(\omega_n) \rangle_i \xrightarrow{T \rightarrow T_c} \chi_i^{-1}(\omega_n) \left\{ (iDS + \omega_n - \xi_i) \hat{1} + (iDS \frac{\phi}{\tilde{\omega}_n} + \phi_i) \hat{\tau}_1 + \varepsilon_i \hat{\tau}_3 \right\}$$

(II, 3.23)

mit

$$\chi_i(\omega_n) = (iDS + \omega_n - \xi_i)^2 - \varepsilon_i^2. \quad (\text{II}, 3.24)$$

Die $\hat{\tau}_1$ -Komponente der Selbstkonsistenzgleichung (II, 3.17) lautet schließlich für $T \rightarrow T_c$

$$\left(\frac{iDS + \tilde{\omega}_n}{(iDS + \tilde{\omega}_n)^2 - \sigma_3^2} \right) \frac{\phi}{\tilde{\omega}_n} \stackrel{T \rightarrow T_c}{=} \frac{x}{\chi_A} \left(iDS \frac{\phi}{\tilde{\omega}_n} + \phi_A \right) + \frac{y}{\chi_B} \left(iDS \frac{\phi}{\tilde{\omega}_n} + \phi_B \right). \quad (\text{II}, 3.25)$$

Den Ausdruck $(iDS + \tilde{\omega}_n) / ((iDS + \tilde{\omega}_n)^2 - \sigma_3^2)$ kann man mit Hilfe der 1-Komponente von (II, 3.17) umschreiben. Es ist

$$\frac{iDS + \tilde{\omega}_n}{(iDS + \tilde{\omega}_n)^2 - \sigma_3^2} = \frac{x}{\chi_A} (iDS + \omega_n - \xi_A) + \frac{y}{\chi_B} (iDS + \omega_n - \xi_B). \quad (\text{II}, 3.26)$$

Daraus ergibt sich für die Paar-Selbstenergie $\phi(\omega_n)$ der gemittelten Legierung die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\phi}{\tilde{\omega}_n} &= \frac{\frac{x}{\chi_A} \phi_A + \frac{y}{\chi_B} \phi_B}{\frac{x}{\chi_A} (\omega_n - \xi_A) + \frac{y}{\chi_B} (\omega_n - \xi_B)} \\ &= \frac{1}{\omega_n} \frac{\frac{x}{\chi_A} \phi_A + \frac{y}{\chi_B} \phi_B}{\frac{x}{\chi_A} \mathcal{Z}_A + \frac{y}{\chi_B} \mathcal{Z}_B} \end{aligned} \quad (II, 3.27)$$

Für verschwindende Elektron-Phonon-Renormalisierung geht die rechte Seite von (II, 3.27) in $\frac{\phi'(\omega_n)}{\omega_n}$ über, wobei

$$\phi' = \frac{\frac{x}{\chi_A} \phi_A + \frac{y}{\chi_B} \phi_B}{\frac{x}{\chi_A} + \frac{y}{\chi_B}} \quad (II, 3.28)$$

ist.

Es liegt nun nahe, einen effektiven Elektron-Phonon-Renormalisierungsparameter

$$\mathcal{Z}_{eff}(\omega_n) = \frac{\frac{x}{\chi_A} \mathcal{Z}_A + \frac{y}{\chi_B} \mathcal{Z}_B}{\frac{x}{\chi_A} + \frac{y}{\chi_B}} \quad (II, 3.29)$$

für die gemittelte Legierung zu definieren, so daß

$$\frac{\phi(\omega_n)}{\tilde{\omega}_n} = \frac{\phi'(\omega_n)}{Z_{\text{eff}}(\omega_n) \omega_n} = \frac{\Delta(\omega_n)}{\omega_n} \quad (\text{II, 3.30})$$

Hier ist $\Delta(\omega_n) = \phi'(\omega_n)/Z_{\text{eff}}(\omega_n)$ der "gap"-Parameter für die gemittelte Legierung. Die linearisierte Eliashberg-Gleichung für diesen Parameter erhalten wir aus (II, 3.27), indem wir $\phi_A(\omega_n)$ und $\phi_B(\omega_n)$ durch $\Delta(\omega_n)$ ausdrücken. Dazu untersuchen wir zunächst die Selbstkonsistenzgleichungen für ϕ_A und ϕ_B . Aus (II, 3.5) folgt z.B.

$$\begin{aligned} \phi_A(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \ell, \ell' \\ s, s', m}} \left\langle \langle s' | \nabla_\beta V_\ell / i \rangle \langle s | \nabla_\alpha V_\ell / i \rangle \right. \\ \left. \times D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega_n - \omega_m) G_{s's}^{12}(\omega_m) \right\rangle_{i=A} \quad (\text{II, 3.31}) \end{aligned}$$

Die Hauptbeiträge zu ϕ_A erhält man für $s=s'$,²⁰ Es ist ziemlich schwierig, die bedingte Konfigurationsmittelung in (II, 3.31) exakt auszuführen. Wir machen daher ähnlich wie in (II, 2.28) die Näherung

$$\begin{aligned} \left\langle \langle s | \nabla_\alpha V_\ell / i \rangle D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega_n - \omega_m) \langle s' | \nabla_\beta V_{\ell'} / i \rangle G_{ss}^{12}(\omega_m) \right\rangle_{i=A} \\ \approx \left\langle \langle s | \nabla_\alpha V_\ell / i \rangle D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega_n - \omega_m) \langle s' | \nabla_\beta V_{\ell'} / i \rangle \right\rangle_{i=A} \\ \times \left\langle G_{ss}^{12}(\omega_m) \right\rangle_s \quad (\text{II, 3.32}) \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Spektraldarstellungen²¹

$$D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega_n) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Im } D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \Omega) \frac{2\Omega d\Omega}{\omega_n^2 - \Omega^2}$$

(II, 3.33)

und

$$G_{ss}^{12}(\omega_n) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\omega}^{+\omega} \frac{\text{Im } G_{ss}^{12}(\omega' + i\delta)}{\omega_n - \omega'} d\omega'$$

(II, 3.34)

läßt sich dann (II, 3.31) umschreiben und man findet mit Hilfe von (II, 3.23) näherungsweise die Gleichung (s. Anhang D)

$$\begin{aligned} \phi_A(\omega) \approx & \int_0^{\omega} \frac{d\omega'}{\omega'} \text{Re}(\Delta(\omega')) \int_0^{\omega_0} d\Omega \left(\beta_A(0) I_{ph}^A(\Omega) + \right. \\ & \left. \times \beta_A(0) I_{ph}^{AA}(\Omega) + \gamma \beta_B(0) I_{ph}^{AB}(\Omega) \right) \cdot \\ & K(\omega, \omega', \Omega) - \\ & \beta_A(0) \bar{U}_A \int_0^{\omega_A} \frac{d\omega'}{\omega'} \text{Re}(\Delta(\omega')) \tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right) . \end{aligned}$$

(II, 3.35)

Hier ist $\bar{U}_A$ das renormalisierte intraatomare Coulomb-Integral an einem A-Atom (s. Anhang D) und

$$I_{ph}^A(\Omega) := \frac{1}{\pi} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \ell, \ell'}} \left\langle \langle i | \nabla_\beta V_{\ell'} | i \rangle \langle i | \nabla_\alpha V_\ell | i \rangle / m D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \Omega) \right\rangle_{i=A}$$

$$I_{ph}^{AA}(\Omega) := \frac{1}{\pi} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \ell, \ell' \\ s(\neq i)}} \left\langle \langle s_A | \nabla_\beta V_{\ell'} | i \rangle \langle s_A | \nabla_\alpha V_\ell | i \rangle / m D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \Omega) \right\rangle_{i=A, s=A}$$

$$I_{ph}^{AB}(\Omega) := \frac{1}{\pi} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \ell, \ell' \\ s(\neq i)}} \left\langle \langle s_B | \nabla_\beta V_{\ell'} | i \rangle \langle s_B | \nabla_\alpha V_\ell | i \rangle / m D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \Omega) \right\rangle_{i=A, s=B}$$

(II, 3.36)

Die lokale Zustandsdichte an einem A(B)-Atom an der Fermikante wurde mit $\nu_{A(B)}(0)$ bezeichnet. Für das Phononenspektrum der Legierung haben wir eine obere Grenzfrequenz ω_0 eingeführt, der "cutoff"-Parameter ω_d ist identisch mit der Bandbreite. Ferner ist

$$\begin{aligned} K(\omega, \omega', \Omega) &\equiv [f(-\omega') + n(\Omega)] \cdot \\ &\quad [(\omega' + \Omega + \omega)^{-1} + (\omega' + \Omega - \omega)^{-1}] \\ &\quad - [f(\omega') + n(\Omega)] \cdot \\ &\quad [(-\omega' + \Omega + \omega)^{-1} + (-\omega' + \Omega - \omega)^{-1}] , \end{aligned}$$

wobei $f(\omega)$ und $n(\omega)$ die Fermi- bzw. die Bose-Verteilungsfunktion ist.

Das Matrixelement für die intraatomare Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen an einem A-Atom

$$\langle i, i | U | i, i \rangle_{i=A} = \left(\int d^3r d^3r' w_i^*(\underline{r}) w_i^*(\underline{r}') U(\underline{r}-\underline{r}') w_i(\underline{r}') w_i(\underline{r}) \right)_{i=A}$$

haben wir mit U_A abgekürzt. Die Wechselwirkung wurde frequenzunabhängig angenommen. Die Gleichung für $\vartheta_B(\omega)$ erhält man aus (II, 3.35) durch Vertauschung von x und y und A und B.

Setzt man die Ausdrücke für $\vartheta_A(\omega)$ und $\vartheta_B(\omega)$ in die Gleichung (II, 3.28) ein, so erhält man mit Hilfe von (II, 3.30) eine Integralgleichung für den gap-Parameter $\Delta(\omega)$ der konfigurationsgemittelten Legierung an der Sprungtemperatur T_c , die gegeben ist durch

$$\Delta(\omega) = [Z_{eff}(\omega)]^{-1} \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega'}{\omega'} \operatorname{Re}(\Delta(\omega')) \int_0^{\omega_0} d\Omega \cdot$$

$$N(0) I_{ph}^{eff}(\Omega) K(\omega, \omega', \Omega) -$$

$$\frac{N(0) U_{eff}}{Z_{eff}(\omega)} \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega'}{\omega'} \operatorname{Re}(\Delta(\omega')) \tanh \left(\frac{\beta_c \omega'}{2} \right) .$$

(II, 3.38)

Dabei gilt für I_{ph}^{eff} der Ausdruck

$$I_{ph}^{eff}(\Omega) \equiv x \frac{g_A(0)}{N(0)} + \frac{g_A(0) I_{ph}^A(\Omega) + x g_A(0) I_{ph}^{AA}(\Omega) + y g_B(0) I_{ph}^{AB}(\Omega)}{N(0)} + y \frac{g_B(0)}{N(0)} + \frac{g_B(0) I_{ph}^B(\Omega) + y g_B(0) I_{ph}^{BB}(\Omega) + x g_A(0) I_{ph}^{BA}(\Omega)}{N(0)} \quad (II, 3.39)$$

wo

$$U_{eff} = \frac{x g_A^2(0) \bar{U}_A + y g_B^2(0) \bar{U}_B}{N(0)^2} \quad (II, 3.40)$$

Die Zustandsdichte der "gemittelten" Legierung an der Fermikante wurde mit $N(0)$ bezeichnet. Man überzeugt sich davon, daß I_{ph}^{eff} und U_{eff} analog zu den entsprechenden über die Fermifläche gemittelten Parametern für ein reines Metall definiert sind^{4,21}. Man erhält daher z.B. $U_{eff} \neq \bar{U}$ für $\bar{U}_A = \bar{U}_B = \bar{U}$, solange die lokale Zustandsdichte an einem A-Atom von der an einem B-Atom verschieden ist. Die Integralgleichung (II, 3.38) kann nach der Methode von McMillan⁴ gelöst werden. Die effektive Elektron-Phonon-Kopplungskonstante ist durch

$$\lambda_{eff} = 2 N(0) \int_0^{\omega_D} \Omega^{-1} I_{ph}^{eff}(\Omega) d\Omega \quad (II, 3.41)$$

gegeben, während man für die effektive Coulomb-Kopplungskonstante den Ausdruck

$$\mu_{eff}^* = \frac{N(0) U_{eff}}{1 + N(0) U_{eff} \ln(\omega_d/\omega_0)} \quad (\text{II, 3.42})$$

erhält. Die Sprungtemperatur T_c wird dann aus der Gleichung

$$T_c \simeq \frac{\langle \omega^2 \rangle^{1/2}}{1.20} \exp \left\{ - \frac{1.04 (1 + \lambda_{eff})}{\lambda_{eff} - \mu_{eff}^* (1 + 0.62 \lambda_{eff})} \right\} \quad (\text{II, 3.43})$$

bestimmt. Hier ist $\langle \omega^2 \rangle^{1/2}$ eine mittlere Phononenfrequenz für die konfigurationsgemittelte Legierung. Es ist

$$\langle \omega^2 \rangle = \frac{\int_0^{\omega_0} \omega I_{ph}^{eff}(\omega) d\omega}{\int_0^{\omega_0} \omega^{-1} I_{ph}^{eff}(\omega) d\omega} \quad (\text{II, 3.44})$$

Man beachte, daß sich der Ausdruck für $I_{ph}^{eff}(\omega)$ (Gl. II, 3.39) für ein reines Metall auf

$$I_{ph}(\omega) = \frac{1}{\pi N} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \ell, \ell' \\ s, i}} \langle s | v_\beta V_\ell | i \rangle \langle s | v_\alpha V_\ell | i \rangle \text{Im} D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega)$$

(II, 3.45)

reduziert. Dieses Resultat ist im wesentlichen identisch mit dem von Appel und Kohn für ein supraleitendes d-Band-Metall²⁰.

Eine eingehende Analyse der in diesem Abschnitt abgeleiteten Ergebnisse geben wir im folgenden Kapitel.

III. DISKUSSION UND NUMERISCHE ANALYSIS

Bevor wir die im vorhergehenden Kapitel entwickelte Theorie auf einige supraleitende binäre Übergangsmetall-Legierungen anwenden, untersuchen wir zunächst die Ausdrücke für die effektive Elektron-Phonon-Kopplungskonstante λ_{eff} (Gl. II, 3.41) und die effektive Coulomb-Wechselwirkungskonstante μ_{eff}^* (Gl. II, 3.42) der Legierung genauer. Der Ausdruck für λ_{eff} ist analog zu dem McMillan-Parameter⁷

$$\lambda = 2 \int_0^{\omega_0} \frac{\alpha^2(\omega) F(\omega)}{\omega} d\omega \quad (\text{III, 1})$$

definiert worden. Hier ist $F(\omega)$ die Phononen-Zustandsdichte und $\alpha^2(\omega)$ die über die Fermioberfläche gemittelte Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Mit Hilfe von (II, 3.44) läßt sich λ_{eff} umschreiben

$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{2 N(0)}{\langle \omega^2 \rangle} \int_0^{\omega_0} \omega I_{\text{ph}}^{\text{eff}}(\omega) d\omega \quad (\text{III, 2})$$

Die Integration in (III, 2) läßt sich ausführen, wenn man sich der allgemein gültigen Summenregel²²

$$\int \omega \operatorname{Im} D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega) d\omega = \frac{\pi}{2M_\ell} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\ell\ell'} \quad (\text{III}, 3)$$

bedient. Die Masse des ℓ -ten Gitteratoms wurde dabei mit M_ℓ bezeichnet. Man erhält z.B.

$$\int \omega I_{ph}^A(\omega) d\omega = \frac{1}{2} \sum_{\ell} \left\langle \frac{1}{M_\ell} \langle 1 | \underline{p}_\ell | 1 \rangle \langle 1 | \underline{p}_\ell | 1 \rangle \right\rangle_{1=A}$$

$$\int \omega I_{ph}^{AA}(\omega) d\omega = \frac{1}{2} \sum_{\ell, s \neq 1} \left\langle \frac{1}{M_\ell} \langle s | \underline{p}_\ell | 1 \rangle \langle s | \underline{p}_\ell | 1 \rangle \right\rangle_{1=A, s=A} \quad (\text{III}, 4)$$

$$\int \omega I_{ph}^{AB}(\omega) d\omega = \frac{1}{2} \sum_{\ell, s \neq 1} \left\langle \frac{1}{M_\ell} \langle s | \underline{p}_\ell | 1 \rangle \langle s | \underline{p}_\ell | 1 \rangle \right\rangle_{1=A, s=B}$$

Die Mittelung in (III,4) bezieht sich jetzt nur noch auf die Konfiguration des Gitterplatzes ℓ .

In der üblichen tight-binding Formulierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung²³ berücksichtigt man nur Matrixelemente $\langle i | \nabla V_\ell | i \rangle$, wo der Gitterplatz ℓ zu i nächstbenachbart ist und Matrixelemente $\langle s | \nabla V_\ell | i \rangle$ mit $\ell = i$ und $\ell = s$, wobei s wiederum nur nächster Nachbar zu i ist.

Damit folgt für (III, 4)

$$\int d\omega \omega I_{ph}^A(\omega) d\omega \approx \frac{n_A}{2M_A} (\mathcal{F}_1^A)^2 + \frac{n_B}{2M_B} \alpha_{AB} (\mathcal{F}_1^B)^2$$

$$\int d\omega \omega I_{ph}^{AA}(\omega) d\omega \approx \frac{\mathcal{Z}}{M_A} (\mathcal{F}_2^A)^2 \quad (\text{III, 5})$$

$$\int d\omega \omega I_{ph}^{AB}(\omega) d\omega \approx \frac{\mathcal{Z}}{2M_A} \beta_{AB} (\mathcal{F}_2^A)^2 + \frac{\mathcal{Z}}{2M_B} \gamma_{AB} (\mathcal{F}_2^B)^2,$$

wobei wir die Abkürzungen

$$\mathcal{F}_1 \equiv \langle 1 | \underline{Q} V(2) | 1 \rangle$$

und

$$\mathcal{F}_2 \equiv \langle 2 | \underline{Q} V(1) | 1 \rangle = \langle 2 | \underline{Q} V(2) | 1 \rangle$$

verwenden. $|1\rangle$ bedeutet ein Wannier-Zustand, der an irgendeinem (festen) Gitterplatz 1 und $|2\rangle$ ein Wannier-Zustand, der an einem (festen) Gitterplatz 2 lokalisiert ist. Dabei ist 2 ein nächster Nachbar zu 1. Sind beide Plätze mit einem Atom von der Sorte $X = A, B$ besetzt, so ist $J_1 = J_1^X$ bzw. $J_2 = J_2^X$.
Ferner ist

$$\alpha_{xy} \equiv \left(\frac{\langle 1_x | \mathcal{V}_y(2) | 1_x \rangle}{\mathcal{F}_1^y} \right)^2; \beta_{xy} \equiv \left(\frac{\langle 2_y | \mathcal{V}_x(1) | 1_x \rangle}{\mathcal{F}_2^x} \right)^2$$

$$f_{xy} \equiv \left(\frac{\langle 2_y | \mathcal{V}_y(2) | 1_x \rangle}{\mathcal{F}_2^y} \right)^2, \quad X, Y = A, B; \quad X \neq Y. \quad (\text{III}, 6)$$

Man findet schließlich, daß λ_{eff} in der Form

$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{N(0)}{\langle \omega^2 \rangle} \frac{\mathcal{F}_{\text{eff}}^2}{M_{\text{eff}}} \quad (\text{III}, 7)$$

geschrieben werden kann, wobei

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{F}_{\text{eff}}^2}{M_{\text{eff}}} \simeq & \frac{XZ}{M_A} \frac{X \rho_A^2(0) + Y \rho_B^2(0) \alpha_{BA}}{N(0)^2} (\mathcal{F}_1^A)^2 \\ & + \frac{2XZ}{M_A} \frac{X \rho_A^2(0) + \frac{1}{2} Y \rho_A(0) \rho_B(0) (\beta_{AB} + f_{BA})}{N(0)^2} (\mathcal{F}_2^A)^2 \\ & + \frac{YZ}{M_B} \frac{X \rho_A^2(0) \alpha_{AB} + Y \rho_B^2(0)}{N(0)^2} (\mathcal{F}_1^B)^2 \\ & + \frac{2YZ}{M_B} \frac{Y \rho_B^2(0) + \frac{1}{2} X \rho_A(0) \rho_B(0) (\beta_{BA} + f_{AB})}{N(0)^2} (\mathcal{F}_2^B)^2 \end{aligned}$$

Für ein reines X-Metall reduziert sich dieser Ausdruck auf

$$\frac{J_X^2}{M_X} = \frac{Z_X}{M_X} (J_{1,0}^X)^2 + \frac{2Z_X}{M_X} (J_{2,0}^X)^2 \quad (\text{III, 9})$$

J_X^2 ist eine Reminiszenz an den McMillan-Parameter⁴

$$\langle J^2 \rangle = \frac{\int \frac{d^2k}{V_F} \int \frac{d^2k'}{V_F'} \left| \sum_i \langle \underline{k}' | \underline{\varepsilon}_{\underline{k}-\underline{k}'} \cdot \underline{\nabla} V_i | \underline{k} \rangle \right|^2}{N(0)^2} \quad (\text{III, 10})$$

Man beachte, daß die Matricelemente $J_{1,0}^X$ und $J_{2,0}^X$ für das reine X-Metall sich wesentlich von den entsprechenden Matricelementen J_1^X und J_2^X in der Legierung unterscheiden können. Der Unterschied wird vor allem durch folgende Effekte verursacht:

- (1) Die lokalisierten elektronischen Wellfunktionen $\phi_i^X(\underline{r})$ an einem X-Atom in der Legierung wird von der Umgebung beeinflusst und braucht daher nicht mit der entsprechenden Wellfunktion im reinen X-Metall übereinzustimmen.
- (2) Der Ladungstransfer kann zu einer beträchtlichen Veränderung des effektiven Ionenpotentials an einem X-Atom in der Legierung führen, wenn man annimmt, daß die d-Elektronen ebenfalls wesentlich zur Abschirmung beitragen²³ und die Elektronendichten an den A- und B- Atomen stark voneinander abweichen.
- (3) Die Matricelemente J_1 und J_2 sind empfindliche Funktionen des atomaren

Volumens²³, für die Legierung folgt daraus, daß der Beitrag der Matrixelemente J_1^A und J_2^A zu λ_{eff} von der "Größe" der B-Atome abhängt und umgekehrt.

Für eine einfache Modellrechnung kombinieren wir die Effekte (1) und (3), indem wir die Wellenfunktion für ein Elektron, das an einem X-Atom lokalisiert ist, durch die asymptotische Slater-Form²³

$$\phi_i^X(r) \equiv \phi^X(r-r_i) \sim \tilde{\phi}(\hat{r}) \exp(-q_o^X |r-r_i|) \quad (\text{III, 11})$$

approximieren. $\tilde{\phi}(\hat{r})$ ist nur noch eine Funktion des Raumwinkels. Vernachlässigt man den Effekt (2), dann folgt damit z.B.

$$(\mathcal{J}_2^X)^2 = \frac{(\mathcal{J}_2^X)^2}{(\mathcal{J}_{2,0}^X)^2} (\mathcal{J}_{2,0}^X)^2 \sim e^{2q_o^X(a^X-a)} (\mathcal{J}_{2,0}^X)^2 \quad (\text{III, 12})$$

Wir haben dabei angenommen, daß man den größten Beitrag zu

$$\mathcal{J}_2 = - \int \phi^*(r-a) \nabla_r V(r) \phi(r) d^3r$$

an den Zellgrenzen bei $r \sim \frac{a}{2}$ erhält, da dort der "Überlapp" am größten ist²³.

Der Vektor $\underline{a}$ verbindet eine Gitterplatz 1 mit einem nächsten Nachbarplatz 2, so daß $|\underline{a}|$ der Abstand zweier nächstbenachbarter Gitterplätze ist. In (III, 12) müssen wir dabei zwischen dem Abstand nächster Nachbarn a^X im reinen X-Metall und dem mittleren Abstand a nächster Nachbarn in der Legierung unterscheiden. Für eine konkrete Rechnung benutzen wir für a die experimentell ermittelten Werte oder die Näherung

$$a = x a^A + y a^B,$$

während wir q_0^X den Tabellen der atomaren Hartree-Fock-Wellenfunktionen²⁹ entnehmen.

Identifizieren wir J_X^2 mit $\langle J^2 \rangle$ und vernachlässigen J_1^2 gegen J_2^2 ²³, so kann λ_{eff} mit Hilfe von

$$\left(J_{2,0}^X \right)^2 \sim \frac{M_X \langle \omega_X^2 \rangle}{2 N_X(0) \mathcal{E}_X} \lambda_X \quad (\text{III, 13})$$

und (III.12) näherungsweise durch die Kopplungskonstante der reinen Metalle ausgedrückt werden. Man erhält

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{eff}} \sim & x \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_A} \frac{\langle \omega_A^2 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} f_{AB} \lambda_A \\ & + y \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_B} \frac{\langle \omega_B^2 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} f_{BA} \lambda_B \end{aligned} \quad (\text{III, 14})$$

wobei

$$f_{AB} = \frac{x \rho_A^2(0) + y \rho_A(0) \rho_B(0) e^{a(q_0^A - q_0^B)}}{N(0) N_A(0)} e^{2q_0^A(a^A - a)}$$

f_{BA} erhält man aus f_{AB} durch Vertauschung von A, B und x,y. Die Parameter β_{XY} und γ_{XY} haben wir dabei ebenfalls mit Hilfe von (III, 11) abgeschätzt.

Wir fassen die Bedeutung der einzelnen Symbole in (III, 14) noch einmal zusammen:

$\lambda_{A(B)}$	Elektron-Phonon-Kopplungskonstante des reinen A(B)-Metalls
$N_{A(B)}(0)$	elektronische Zustandsdichte pro Atom des reinen A(B)-Metalls an der Fermikante
$N(0)$	elektronische Zustandsdichte pro Atom der konfigurationsgemittelten Legierung A_xB_y an der Fermikante
$\rho_{A(B)}(0)$	lokale elektronische Zustandsdichte eines A(B)-Atoms an der Fermikante in der Legierung
z	Koordinationszahl der Legierung
$z_{A(B)}$	Koordinationszahl des reinen A(B)-Metalls
$\langle \omega \rangle_{A(B)}^{\frac{1}{2}}$	mittlere Phononenfrequenz des reinen A(B)-Metalls
$\langle \omega \rangle^{\frac{1}{2}}$	mittlere Phononenfrequenz der konfigurationsgemittelten Legierung.

Die Zustandsdichten $\rho_{A(B)}(0)$ und $N(0) = x \rho_A(0) + y \rho_B(0)$ berechnen wir mit Hilfe der Modellzustandsdichte (II, 3.19). f_{AB} nimmt dann die Form

$$f_{AB} = \frac{1 + \left(\frac{\varepsilon_A^0}{D}\right)^2}{1 + \left(\frac{\varepsilon_A}{D}\right)^2} \frac{x \left(1 + \left(\frac{\varepsilon_B}{D}\right)^2\right) + y \left(1 + \left(\frac{\varepsilon_A}{D}\right)^2\right) e^{a(q_0^A - q_0^B)}}{1 + x \left(\frac{\varepsilon_B}{D}\right)^2 + y \left(\frac{\varepsilon_A}{D}\right)^2} \cdot e^{2q_0^A(a^A - a)} \quad (\text{III, 15})$$

an.

Hier ist $\varepsilon_{A(B)}^0$ das Zentrum des d-Bandes des reinen A(B)-Metalls, das in Bezug auf die Fermi-Energie gemessen wird. Wir setzen

$$\varepsilon_A^0 - \varepsilon_B^0 = \Delta$$

und bezeichnen für $\Delta \neq 0$ dasjenige Metall mit A, dessen d-Band-Zentrum in Bezug auf das Vakuum energetisch höher liegt, so daß stets $\Delta \geq 0$.

Wir nehmen ferner an, daß sich Δ beim Legieren nicht ändert, d.h.

$$\frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{D} = \frac{\Delta}{D} = \text{konst.} \quad (\text{III, 16})$$

$\frac{\varepsilon_A}{D}$ bzw. $\frac{\varepsilon_B}{D}$ für die Legierung wird wiederum bzgl. der jeweiligen Fermi-Energie gemessen und aus der Bedingung

$$x \int_{-\infty}^0 \rho_A(\varepsilon) d\varepsilon + y \int_{-\infty}^0 \rho_B(\varepsilon) d\varepsilon = x m_A + y m_B \quad (\text{III, 17})$$

berechnet. Hier ist $m_{A(B)}$ die mittlere Anzahl der d-Elektronen pro A(B)-Atom. Da die effektive Zustandsdichte pro Atom auf Eins normiert ist, schreiben wir

$$m_A = \frac{1+\alpha}{2}, \quad m_B = \frac{1+\alpha+\beta}{2} \quad (\text{III, 18})$$

wobei der Parameter α ($-1 \leq \alpha \leq +1$) die Abweichung von einem halb-vollen d-Band ($\alpha = 0$) beschreibt, während β die Differenz in der Anzahl der Valenzelektronen der beiden Atomsorten angibt. Aus der Gleichung (III,17) folgt damit

$$x \arctan \frac{\epsilon_A}{D} + y \arctan \frac{\epsilon_B}{D} = -\frac{\pi}{2} (\alpha + y\beta). \quad (\text{III, 19})$$

Durch Vorgabe von x , α , β und $\frac{A}{D}$ kann jetzt λ_{eff} mit Hilfe der Kopplungskonstanten der reinen Metalle aus (III, 14) berechnet werden.

Zur Berechnung von ν_{eff}^* verwenden wir die Beziehung (II, 3.40). Mit Hilfe der CPA-Modellzustandsdichte (II, 3.19) folgt

$$N(0) u_{\text{eff}} = x g_{AB} N_A(0) \bar{u}_A + y g_{BA} N_B(0) \bar{u}_B \quad (\text{III, 20})$$

mit

$$g_{AB} = \frac{1 + \left(\frac{\varepsilon_A^0}{D}\right)^2}{1 + \left(\frac{\varepsilon_A}{D}\right)^2} \frac{1 + \left(\frac{\varepsilon_B}{D}\right)^2}{1 + x \left(\frac{\varepsilon_B}{D}\right)^2 + y \left(\frac{\varepsilon_A}{D}\right)^2} \quad (\text{III}, 21)$$

g_{BA} erhält man aus g_{AB} durch Vertauschung von A, B und x, y. Für $U_{A(B)}$ benutzen wir in einer ersten Näherung die entsprechenden Werte für ein reines A(B)-Metall. $N_{A(B)}(0)$ $U_{A(B)}$ berechnen wir aus

$$\mu_{A(B)}^* = \frac{N_{A(B)}(0) \bar{U}_{A(B)}}{1 + N_{A(B)}(0) \bar{U}_{A(B)} \ln(W_d/\omega_0)_{A(B)}},$$

wobei für die meisten Übergangsmetalle in guter Näherung

$$\ln(W_d/\omega_0) \approx 5.$$

gesetzt werden kann.⁴

Die folgenden vier Beispiele zeigen, daß es auf der Grundlage dieses einfachen Modells bereits möglich ist, die empirischen Daten zufriedenstellend zu reproduzieren. Insbesondere kann detailliert untersucht werden, welche Effekte die Supraleitung günstig beeinflussen oder sie unterdrücken. In Fig. 4 ist der T_C -Verlauf von Nb_xMo_{1-x} in Abhängigkeit von der Mo-Konzentration aufgetragen. Die empirischen Werte^{4,29} sind durch Kreuze markiert, die "ausgezogene" Kurve entspricht dem vorliegenden Modell. Im weak scattering limit $\frac{\varepsilon_{Nb} - \varepsilon_{Mo}}{D} \rightarrow 0$ erhält man die gestrichelte Kurve. Der Verlauf der Sprungtemperatur wird in diesem Fall in erster Linie von der Konfigurationsabhängigkeit des Phononen-

Beitrages bestimmt, für den wir die empirischen Werte einsetzen²⁹.

Im zweiten Beispiel V_xTa_{1-x} liegt eine Legierung zweier isoelektronischer Übergangsmetalle ($\beta = 0$) vor. Die Veränderung der elektronischen Matrixelemente mit der Konfiguration der Legierung wirkt sich in diesem Beispiel besonders empfindlich auf den T_C -Verlauf aus. So ergibt sich in Fig. 5 für $q_0^{Ta} = 1.24$ ²³ die gestrichelte Kurve, die im Gegensatz zu der ausgezogenen Kurve und den empirischen Daten³⁰ nicht ein Minimum sondern ein Maximum im T_C -Verlauf aufweist.

Im dritten Beispiel Mo_xRe_{1-x} bewirken die Zunahme der Beiträge der elektronischen Matrixelemente und die Abnahme des Phononen-Beitrages eine starke Vergrößerung der Elektron-Phonon-Kopplungskonstanten λ im Mo-reichen Konzentrationsbereich. Zusätzlich verringert sich die Coulomb-Wechselwirkung drastisch. Beide Effekte erzeugen den starken Anstieg (Verzehnfachung!) der Sprungtemperatur im betreffenden Konzentrationsbereich (Fig. 6).

Im vierten Beispiel $ZrRh_{1-x}$ haben wir λ_{Rh} aus dem Mittelwert der Elektron-Phonon-Kopplungskonstanten der Nachbar-Elemente Ru, Os und Ir berechnet. Für die Coulomb-Kopplungskonstante wurde der Wert 0.332 eingesetzt. Durch diese Wahl wird T_C für Rh praktisch Null. In der verdünnten Legierung Zr_xRh_y mit $y \rightarrow 0$ wird die Zunahme der Coulomb-Abstoßung, die durch Zufügen von Rh-Atomen auftritt, durch eine Vergrößerung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung überkompensiert. Dadurch kommt ein Anstieg in der supraleitenden Sprungtemperatur zustande (Fig.7) Physikalisch läßt sich dies etwa folgendermaßen erklären: Der Einbau von einzelnen Rh-Atomen "lockert" das Zr-Gitter, wodurch sich θ_D bzw. $\langle \omega^2 \rangle$ zu kleineren Werten verschiebt, gleichzeitig wird aber auch der elektronische Überlapp zwischen Zr- und Rh- Atomen vergrößert, da Rh im Vergleich zu Zr sechs d-Elektronen mehr besitzt. Der Beitrag der Matrixelemente $\langle 1_{Zr} | \nabla V_{Zr}(1) | 2_{Rh} \rangle$ und $\langle 1_{Rh} | \nabla V_{Rh}(1) | 2_{Zr} \rangle$ spielt daher eine dominierende Rolle.

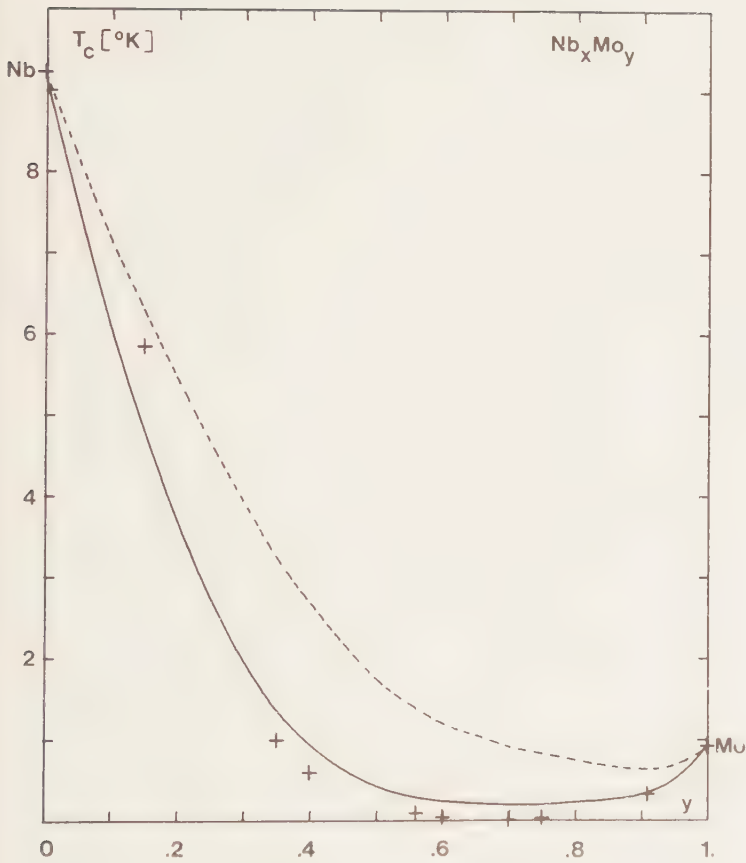


Fig. 4 T_c - Verlauf der Legierung Nb_xMo_y in Abhängigkeit von der Mo - Konzentration (siehe Text).

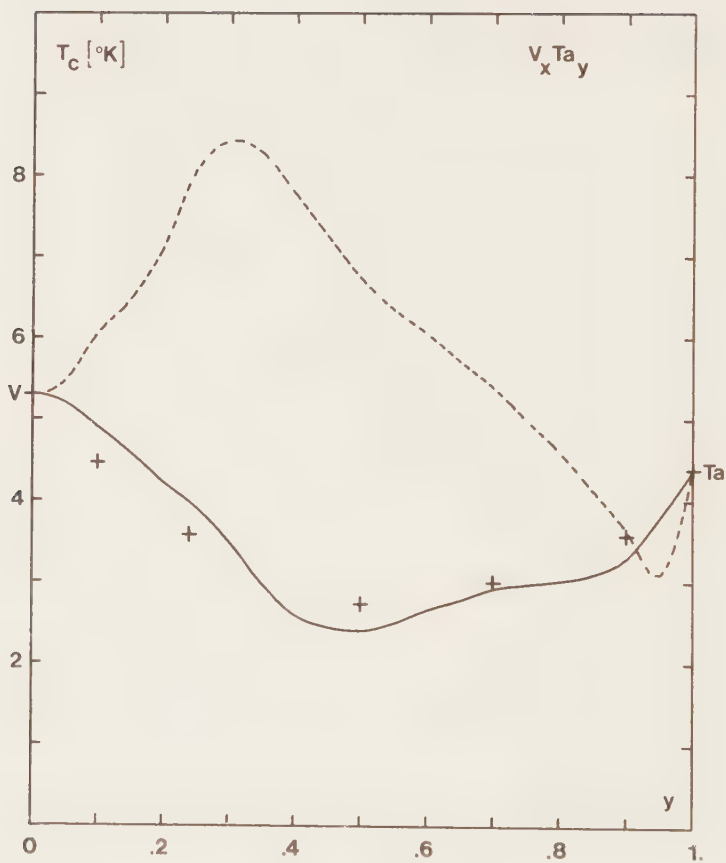


Fig. 5 T_c - Verlauf der Legierung V_xTa_y in Abhängigkeit von der Ta - Konzentration (siehe Text).

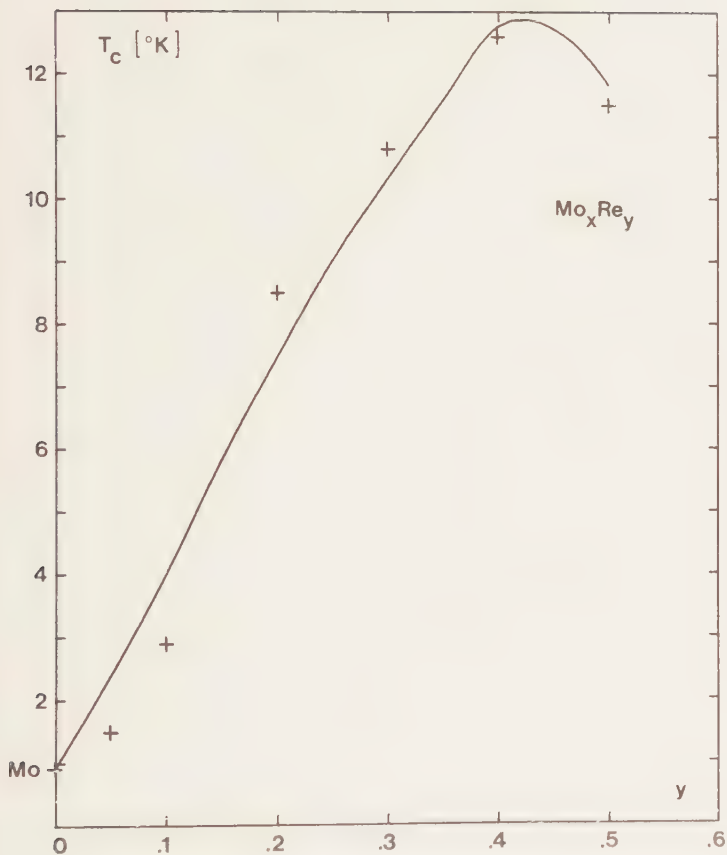


Fig. 6 T_c - Verlauf der Legierung Mo_xRe_y in Abhängigkeit von der Re - Konzentration (siehe Text).

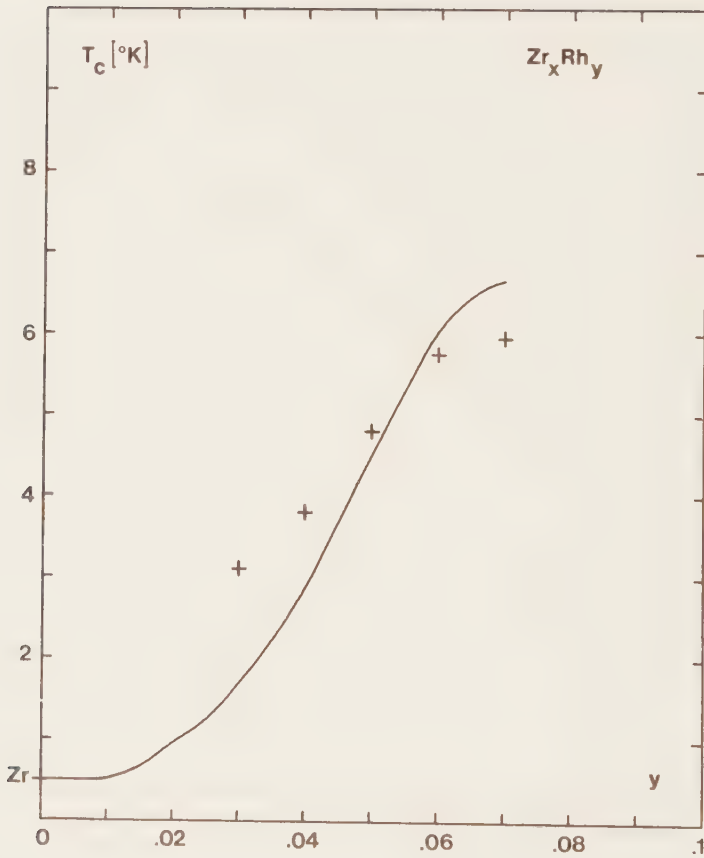


Fig. 7 Verdünnte Zr_xRh_y - Legierung: Verlauf der Sprungtemperatur T_C als Funktion der Konzentration der Verunreinigung (siehe Text).

$\text{Nb}_x\text{Mo}_{1-x}$	$\frac{1}{D} = 1.156$	$\alpha = -0.02$	$\epsilon = 0.27$	$z = 8$	
	$\chi_{\text{O}}^{\text{Mo}} - \chi_{\text{O}}^{\text{Nb}} = 0.11 \text{ \AA}^3$	$d^{\text{Nb}} = 2.66 \text{ \AA}$	$d^{\text{Mo}} = 2.72 \text{ \AA}$	$z_{\text{Nb}} = 8$	
				$z_{\text{Mo}} = 8$	
x	λ	ν	$T_D(^{\circ}\text{K})$	$T_C^{\text{calc}}(^{\circ}\text{K})$	$T_C^{\text{exp}}(^{\circ}\text{K})$
1.00	0.320	0.130	278.	9.23	9.23
0.95	0.746	0.129	287.	7.61	
0.90	0.680	0.128	296.	6.10	
0.85	0.624	0.127	304.	4.82	5.85
0.80	0.573	0.126	312.	3.69	
0.75	0.530	0.124	320.	2.74	
0.70	0.495	0.123	328.	1.96	
0.65	0.447	0.121	336.	1.35	1.00
0.60	0.415	0.119	343.	0.93	0.60
0.55	0.387	0.117	350.	0.63	
0.50	0.363	0.114	357.	0.42	
0.45	0.345	0.112	362.	0.30	0.10
0.40	0.332	0.110	366.	0.24	0.05
0.35	0.325	0.109	368.	0.21	
0.30	0.320	0.107	370.	0.19	0.02
0.25	0.321	0.107	370.	0.21	0.04
0.20	0.325	0.117	370.	0.23	
0.15	0.330	0.107	370.	0.24	
0.10	0.341	0.104	368.	0.21	0.13
0.05	0.362	0.109	367.	0.21	
0.00	0.400	0.110	345.	0.22	0.27

Tab. 1

$V_x T_{a1-x}$	$\frac{\Delta}{D} = 2.02$		$\alpha = -0.263$		$\beta = 0.0$		$z = 8$
	$q_0^V - q_0^{Ta} = 0.11 \text{ \AA}^{-1}$		$a^V = 2.62 \text{ \AA}$		$a^{Ta} = 2.86 \text{ \AA}$		$z_V = 8$
							$z_{Ta} = 8$
x	λ	ν^*	$c_D(^{\circ}K)$	$T_c^{calc}(^{\circ}K)$	$T_c^{emp}(^{\circ}K)$		
1.00	0.610	0.130	375.	5.31	5.31		
0.95	0.598	0.126	360.	5.00			
0.90	0.596	0.121	341.	4.96	4.47		
0.85	0.577	0.114	326.	4.58			
0.80	0.556	0.107	312.	4.21			
0.75	0.543	0.101	298.	4.00	3.58		
0.70	0.522	0.099	290.	3.48			
0.65	0.509	0.102	284.	2.96			
0.60	0.506	0.109	279.	2.58			
0.55	0.514	0.115	274.	2.43			
0.50	0.523	0.120	270.	2.40	2.73		
0.45	0.536	0.123	266.	2.50			
0.40	0.550	0.125	262.	2.66			
0.35	0.560	0.126	259.	2.78			
0.30	0.569	0.127	256.	2.92	3.00		
0.25	0.573	0.126	254.	2.98			
0.20	0.575	0.126	252.	3.02			
0.15	0.575	0.125	251.	3.10			
0.10	0.580	0.124	250.	3.20	3.58		
0.05	0.600	0.123	250.	3.64			
0.00	0.650	0.130	250.	4.39	4.39		

Tab. 2

$\text{Mo}_x\text{Re}_{1-x}$	$\frac{\lambda}{D} = 0.791$		$\lambda = 0.161$	$\mu = 0.53$	$z = 8$
	$\alpha_{\text{O}}^{\text{Mo}} - \alpha_{\text{O}}^{\text{Re}} = 0.57 \text{ Å}^{-1}$		$a^{\text{Mo}} = 2.72 \text{ Å}$	$a^{\text{Re}} = 2.63 \text{ Å}$	$z_{\text{Mo}} = 8$
					$z_{\text{Re}} = 12$
x	λ	r^*	$t_{\text{D}}(^\circ\text{K})$	$t_{\text{C}}^{\text{calc}}(^\circ\text{K})$	$t_{\text{C}}^{\text{exp}}(^\circ\text{K})$
1.00	0.460	0.110	345.	0.92	0.92
0.95	0.468	0.104	337.	2.38	1.50
0.90	0.525	0.100	330.	4.00	2.9
0.85	0.581	0.094	320.	5.84	
0.80	0.628	0.089	310.	7.48	8.5
0.75	0.674	0.083	298.	9.03	
0.70	0.716	0.076	285.	10.33	10.8
0.65	0.764	0.070	269.	11.58	
0.60	0.823	0.062	250.	12.77	12.6
0.55	0.890	0.055	238.	12.72	
0.50	0.787	0.048	230.	11.82	11.5
0.00	0.460	0.110	290.	1.7	1.7

Tab. 3

Zr_xRh_{1-x}	$\frac{\Delta}{D} = 0.184$	$\alpha = -0.573$	$B = 1.20$	$z = 8$	
	$q_0^{Rh}-q_0^{Zr} = 0.46 \text{ \AA}^{-1}$	$a^{Zr} = 3.17 \text{ \AA}$	$a^{Rh} = 2.69 \text{ \AA}$	$z_{Zr} = 8(12)$	
				$z_{Rh} = 12$	
x	λ	μ^*	$\Theta_{\gamma}(^{\circ}K)$	$T_c^{calc}(^{\circ}K)$	$T_c^{exp}(^{\circ}K)$
1.000	0.430	0.0900	280.	0.50	0.50
0.995	0.464	0.0920	275.	0.50	
0.990	0.351	0.0921	269.	0.52	
0.985	0.367	0.0922	264.	0.67	
0.980	0.393	0.0923	256.	0.96	
0.975	0.414	0.0923	250.	1.25	
0.970	0.445	0.0924	242.	1.67	
0.965	0.479	0.0924	234.	2.22	
0.960	0.516	0.0925	226.	2.86	
0.955	0.563	0.0925	217.	3.67	
0.950	0.611	0.0925	209.	4.50	4.8
0.945	0.658	0.0925	202.	5.30	
0.940	0.702	0.0925	196.	6.04	5.75
0.935	0.729	0.0925	193.	6.46	
0.930	0.740	0.0925	192.	6.66	5.95
0.000	~ 0.420	~ 0.3320	480.	0.0	

Tab. 4

Die jeweiligen Parameterwerte für die einzelnen Legierungen sind in den Tabellen 1-4 zusammengestellt.

In der vorangehenden Diskussion haben wir uns in erster Linie mit dem "elektronischen" Beitrag zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung in der Legierung beschäftigt. In den numerischen Beispielen wurde der "Phonon"-Beitrag in Form einer mittleren Phononenfrequenz $\langle \omega^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$ lediglich als empirischer Input-Parameter behandelt. Die hier formulierte Theorie gestattet es jedoch, diesen von McMillan eingeführten Parameter⁴ in Abhängigkeit von der kompositionellen Zusammensetzung der Legierung explizit zu studieren. Dazu benutzen wir die Definition von $\langle \omega^2 \rangle$ (Gl.II,3.44) und machen von der Summenregel

$$\int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \operatorname{Im} D_{\alpha\beta}(\ell, \ell', \omega) = \frac{1}{2} \pi \phi_{\alpha\beta}^{-1}(\ell, \ell') \quad (\text{III, 22})$$

Gebrauch²². Hier ist ϕ die Matrix der Kraft-Konstanten des Ionengitters.

Damit folgt in der üblichen tight-binding Näherung

$$\int \frac{d\omega}{\omega} I_{ph}^X(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \mathbf{z}, \mathbf{z}'}} \left\langle \langle 1/\mathbf{e}_\alpha V_2 | 1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') \langle 1/\mathbf{e}_\beta V_2 | 1 \rangle \right\rangle_{1=X} \quad (\text{III, 23a})$$

und

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{\omega} I_{ph}^{XY}(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left\langle \langle 2/v_{\alpha} V_1/1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(1,1) \langle 2/v_{\beta} V_1/1 \rangle \right. \\ + \langle 2/v_{\alpha} V_2/1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(2,2) \langle 2/v_{\beta} V_2/1 \rangle \\ + \langle 2/v_{\alpha} V_1/1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(1,2) \langle 2/v_{\beta} V_2/1 \rangle \\ \left. + \langle 2/v_{\alpha} V_2/1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(2,1) \langle 2/v_{\beta} V_1/1 \rangle \right\rangle_{1=X, 2=Y} \end{aligned}$$

(III, 23b)

wobei $X, Y = A, B$; die Indizes 2 und 2' beziehen sich auf nächste Nachbaratome des Atoms am Gitterplatz 1.

Setzt man nun die Ausdrücke (III, 5) und (III, 23) in (II, 3.44) ein, so erhält man eine tight-binding-Darstellung für die mittlere Phononen-Frequenz $\langle \omega^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$ der Legierung, aus der im Prinzip dieser Parameter in Abhängigkeit von der Zusammensetzung der Legierung berechnet werden kann. Allerdings ist $\langle \omega^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$ eine verhältnismäßig komplizierte Funktion nicht nur der Kraftkonstanten $\phi^{XY}(l, l')$ sondern auch der elektronischen Matrixelemente J_1^X und J_2^X . Die Zerlegung (III, 2) von λ_{eff} in einen elektronischen und einen Phononen-Anteil erweist sich als nicht besonders zweckmäßig, wenn man im Detail studieren will, wie in der Legierung der Phononen-Anteil mit dem elektronischen Anteil gekoppelt ist. Wir gehen daher auf den Ausdruck (II, 3.41) für λ_{eff} zurück und wenden dort die Summenregel (III, 22) direkt an, so daß wir die Resultate (III, 23) ein-

setzen können. Man erhält

$$\begin{aligned}
 \lambda_{\text{eff}} \sim & x \frac{\rho_A(0)}{N(0)} \left\{ x \rho_A(0) \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ 2}} \left\langle \langle 2 | \nabla_{\alpha} V_1 | 1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(1,1) \langle 2 | \nabla_{\beta} V_1 | 1 \rangle \right. \right. \\
 & + \langle 2 | \nabla_{\alpha} V_2 | 1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(2,2) \langle 2 | \nabla_{\beta} V_2 | 1 \rangle \\
 & + \langle 2 | \nabla_{\alpha} V_1 | 1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(1,2) \langle 2 | \nabla_{\beta} V_2 | 1 \rangle \\
 & \left. \left. + \langle 2 | \nabla_{\alpha} V_2 | 1 \rangle \phi_{\alpha\beta}^{-1}(2,1) \langle 2 | \nabla_{\beta} V_1 | 1 \rangle \right\rangle_{1=A, 2=A} \right\} + \\
 & y \rho_B(0) \sum_{\alpha, \beta, 2} \langle \dots \rangle_{1=A, 2=B} \Big\} + \\
 & y \frac{\rho_B(0)}{N(0)} \left\{ y \rho_B(0) \sum_{\alpha, \beta, 2} \langle \dots \rangle_{1=B, 2=B} \right. \\
 & \left. + x \rho_A(0) \sum_{\alpha, \beta, 2} \langle \dots \rangle_{1=B, 2=B} \right\} ,
 \end{aligned}$$

(III, 24)

wobei wir wiederum die Beiträge mit Matrixelementen von der Form J_2 als dominierend angenommen haben.

Aus dieser Formel kann man einige interessante Resultate ablesen für den Fall, daß

- (a) $J_2^{AB} = 0 = J_2^{BA}$ (elektronischer split-band limit). Dieser Grenzfall impliziert, daß in (III, 24) keine Kraftkonstanten $\emptyset_{\alpha\beta}(1,2)$ auftreten, wo sich 1 und 2 auf verschiedene Atome beziehen.
- (b) $\emptyset_{\alpha\beta}(\ell, \ell') = 0$, wenn die Gitterplätze ℓ und ℓ' mit verschiedenen Atomen besetzt sind (split-band limit für die Phononen). Dies führt dazu, daß die beiden letzten Summanden in $\langle \dots \rangle_{1=A,2=B}$ und $\langle \dots \rangle_{1=B,2=A}$ verschwinden. Es treten aber dennoch Matrixelemente J_2^{AB} und J_2^{BA} auf.

Befindet man sich demnach im elektronischen split-band limit, d.h. es gibt keine elektronischen Übergänge zwischen A- und B- Zuständen, so hat dies zur Folge, daß die Kopplung zwischen den Schwingungen der A- und B-Gitteratome schwach ist. Die umgekehrte Situation braucht jedoch nicht eintreten.

IV. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

In dieser Arbeit haben wir eine Theorie entwickelt, die in der Lage ist, das supraleitende Verhalten von d-Band-Metall-Legierungen A_xB_{1-x} über den gesamten Konzentrationsbereich x korrekt zu beschreiben. Die Supraleitung wurde im Rahmen der üblichen Nambu-Gor'kov-Formulierung^{11,21,25} behandelt, wobei es sich als zweckmäßig erweist, eine lokale Beschreibung zu wählen durch Verwendung der sog. Wannier-Darstellung. Die Legierung wurde in der Coherent Potential Approximation (CPA)⁸ behandelt. Durch eine verallgemeinerte Matrix-Form der CPA wird es möglich, die Supraleitung und die atomare Unordnung miteinander zu kombinieren. Damit kann das Zusammenspiel dieser beiden Effekte über die bisherigen Theorien (verdünnte Legierung, rigid band etc.) hinaus ohne Einschränkung im gesamten Konzentrationsbereich der Legierung studiert werden.

Wir erhalten im Rahmen eines einfachen d-Band-Modells sowohl in der BCS-Theorie als auch in der Strong-coupling Theorie der Supraleitung eine Selbstkonsistenzgleichung für den effektiven Ordnungsparameter Δ_{eff} der konfigurationsgemittelten Legierung, aus der man Ausdrücke für die effektive Elektron-Phonon-Kopplungskonstante λ_{eff} und die effektive Elektron-Elektron-Kopplungskonstante U_{eff} ableitet. Die Lösung der Selbstkonsistenzgleichung für $\Delta_{\text{eff}}(T \rightarrow T_c)$ ergibt eine Gleichung zur Bestimmung der supraleitenden Sprungtemperatur T_c der Legierung. In der Strong-coupling Version dieser Theorie konnten wir zeigen, daß in der tight-binding Näherung λ_{eff} vollständig bestimmt wird durch die elektronischen Matrixelemente vom Typ $J_1 \equiv \langle 1 | \nabla V(2) | 1 \rangle$ und $J_2 \equiv \langle 1 | \nabla V(1) | 2 \rangle$, von den lokalen elektronischen Zustandsdichten $\rho_{A(B)}(E_F)$ an den A(B)-Atomen und von den

Kraftkonstanten $\phi_{\alpha\beta}(\lambda, \lambda')$ der Legierung. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird dabei durch die Ankopplung der Kraftkonstanten an die elektronischen Matrixelemente gekennzeichnet. J_1 und J_2 für die Legierung haben wir mit Hilfe eines einfachen Modells aus den entsprechenden Matrixelementen der reinen Metalle berechnet, auf eine selbstkonsistente Bestimmung von J_1 und J_2 sowie der Kraftkonstanten ϕ der Legierung wurde verzichtet, sie ist Ausgangspunkt für eine weiterführende Diskussion der vorliegenden Theorie²⁶.

Die Strong-coupling Supraleitung in Legierungen haben wir analog zur McMillan-Theorie⁴ behandelt. Man findet, daß λ_{eff} wie die Kopplungskonstante für ein reines Metall in der Form

$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{N(0) J_{\text{eff}}^2}{M_{\text{eff}} \langle \omega^2 \rangle_{\text{eff}}}$$

geschrieben werden kann. Es sei an dieser Stelle jedoch darauf hingewiesen, daß die vorliegende Theorie nicht an den McMillan-Formalismus gebunden ist.

Die numerischen Resultate, die auf der Grundlage eines einfachen tight-binding Modells erhalten wurden, stimmen bemerkenswert gut mit den empirischen Daten überein.

Die Theorie kann jedoch über das tight-binding-Modell hinaus weiter entwickelt werden. Sie kann ferner auch auf eindimensionale supraleitende Systeme angewandt werden, z.B. A-15-Verbindungen. Die Übergangsmetall-Atome sind in diesen Verbindungen längs linearer Ketten angeordnet, wobei man annimmt, daß die Supraleitung in erster Linie von den d-Elektronen der Kettenatome produziert wird. Legiert man verschiedene Übergangsmetalle in der Kette, so kann dies zu beträcht-

lichen Veränderungen in der Sprungtemperatur führen.

Obwohl wir uns in dieser Arbeit in erster Linie auf die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in supraleitenden Legierungen konzentriert haben, zeigen auch normalleitende Legierungen interessante physikalische Eigenschaften, die vermutlich auf der Konfigurationsabhängigkeit der Elektron-Phonon-Wechselwirkung basieren. So werden z.B. die spezifische Wärme und der elektrische Widerstand beträchtlich durch das Legieren beeinflusst. In den meisten Fällen findet man kein "Nordheim"-Verhalten des elektrischen Widerstandes. In Halbleiter-Legierungen führen die durch Phononen assistierten elektronischen Übergänge zwischen lokalisierten Zuständen zu einer endlichen Leitfähigkeit, die proportional zum Quadrat der effektiven Elektron-Phonon-Kopplungskonstanten ist.

Von besonderem Interesse ist zur Zeit die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in quasi-eindimensionalen organischen Systemen, z.B.

$K_2 Pt(CN)_4 Br_{0.3} \cdot 3H_2O$. Diese Verbindungen enthalten Übergangsmetall-Atome, die wiederum längs linearer Ketten angeordnet sind. Auch hier kann man annehmen, daß eine substitutionelle Unordnung längs der Ketten die Leitfähigkeit bzw. den elektrischen Widerstand beeinträchtigt und einen Einfluß auf den in diesen Verbindungen auftretenden Metall-Isolator-Übergang haben wird.

In allen Fällen kann die in dieser Arbeit entwickelte Methode zur Behandlung substitutioneller Unordnung als Ausgangspunkt für eine Theorie benutzt werden.

ANHANG A

Die Coherent Potential Approximation

(a) Ableitung aus der Theorie der Vielfachstreuung

Wir beschreiben die Elektronen in der Legierung im Ein-Teilchen-Bild. Der Hamiltonian für eine vorgegebene Konfiguration sei H . Die zugehörige ein-Teilchen-Greenfunktion wird mit G bezeichnet. Es ist

$$G(z) = (z - H)^{-1} \quad (\text{A. 1})$$

Die physikalisch relevanten Größen werden aus der Greenfunktion $G^0(z)$ der konfigurationsgemittelten Legierung bestimmt. Den entsprechenden effektiven Hamiltonian H_{eff} definiert man durch die Gleichung

$$G^0(z) = (z - H_{\text{eff}})^{-1} \quad (\text{A. 2})$$

H_{eff} besitzt die Symmetrie-Eigenschaften des leeren Gitters, ist aber i.a. nichthermetisch und energieabhängig: $H_{\text{eff}} = H_{\text{eff}}(z)$. Aus den analytischen Eigenschaften von $G^0(z)$ folgt die Analytizität von $H_{\text{eff}}(z)$ in den beiden komplexen Halbebenen und die Relation

$$H_{\text{eff}}(z^*) = H_{\text{eff}}^+(z) \quad (\text{A. 3})$$

Sei $K = K(z)$ eine Näherung zu dem exakten effektiven Hamiltonian mit denselben analytischen Eigenschaften wie H_{eff} ; R sei die zugehörige

Ein-Teilchen-Greenfunktion $R = (z - K(z))^{-1}$. (A. 4)

$G^{(0)}(z)$ kann formal nach $H_{\text{eff}} - K$ entwickelt werden:

$$G^0(z) = (z - K - (H_{\text{eff}} - K))^{-1} = R^{-1} (1 - R(H_{\text{eff}} - K))^{-1} = (1 - R(H_{\text{eff}} - K))^{-1} R$$

oder

$$G^0(z) = R + R (H_{\text{eff}} - K) G^0(z) . \quad (\text{A. 5})$$

An dieser Stelle ist es zweckmäßig, die Streumatrix $\langle T \rangle$ für die gemittelte Legierung einzuführen durch

$$G^0(z) = R + R \langle T \rangle R . \quad (\text{A. 6})$$

Durch Vergleich mit (A.5) findet man ($V_{\text{eff}} = H_{\text{eff}} - K$)

$$\langle T \rangle = V_{\text{eff}} + V_{\text{eff}} R V_{\text{eff}} + V_{\text{eff}} R V_{\text{eff}} R V_{\text{eff}} + \dots$$

$$= (1 + V_{\text{eff}} R + V_{\text{eff}} R V_{\text{eff}} R + \dots) V_{\text{eff}}$$

$$= (1 - V_{\text{eff}} R)^{-1} V_{\text{eff}}$$

oder $\langle T \rangle = V_{\text{eff}} + V_{\text{eff}} R \langle T \rangle . \quad (\text{A. 7})$

(A.7) wird nach H_{eff} aufgelöst

$$H_{\text{eff}} = K + \langle T \rangle (1 + R \langle T \rangle)^{-1} . \quad (\text{A. 8})$$

Dies ist die zentrale Gleichung, um H_{eff} zu bestimmen. Man kann sie auf

zweierlei Weise verwenden:

1. Man berechnet für ein vorgegebenes K die Streumatrix $\langle T[K] \rangle$
oder
2. Man benutzt die Bedingung

$$\langle T[K] \rangle = 0, \quad (A. 9)$$

um K zu bestimmen. Aus (A.8) folgt dann, daß dieses so bestimmte K mit H_{eff} identisch ist.

Wir wollen auf die erste Methode nicht näher eingehen. Sie kann zu Konvergenz-Schwierigkeiten in (A.5) führen, wenn der vorgegebene Hamiltonian K von dem exakten effektiven Hamiltonian H_{eff} stark abweicht. Die zweite Methode dagegen ist selbstkonsistent. Die Bedingung (A.9) erzwingt die Konvergenz des Verfahrens. (A.9) kann noch verschärft werden für den Fall, daß sich das Störpotential $V = H - K$ für eine vorgegebene Konfiguration als Summe von Störpotentialen an den einzelnen Gitterplätzen schreiben läßt

$$V = \sum_n V_n \quad (A. 10)$$

Die Bedingung (A.10) gilt z.B. für (II, 1.1) und (I, 8) bzw. für (II, 2.12) und (II, 2.19).

Für eine vorgegebene Konfiguration erhält man für die Streumatrix T analog zu (A. 7)

$$T = V + V R T. \quad (A. 11)$$

Einsetzen von (A.10) liefert

$$T = \sum_n V_n (1 + R T) = \sum_n Q_n \quad (A. 12)$$

woraus

$$\begin{aligned} Q_n &= V_n(1 + RT) = V_n(1 + R \sum_m Q_m) \\ &= V_n + V_n R Q_n + V_n R \cdot \sum_{m \neq n} Q_m \end{aligned} \quad (\text{A. 13})$$

oder nach Q_n aufgelöst

$$Q_n = (1 - V_n R)^{-1} V_n (1 + R \cdot \sum_{m \neq n} Q_m) . \quad (\text{A. 14})$$

(A. 14) legt es nahe, die Streumatrix T_n für die Streuung an einem Gitter-Störpotential V_n einzuführen durch

$$T_n = (1 - V_n R)^{-1} V_n \quad (\text{A. 15})$$

Die totale Streumatrix (A.12) läßt sich damit umschreiben

$$T = \sum_n T_n (1 + R \sum_{m \neq n} Q_m) . \quad (\text{A. 16})$$

Ersetzt man hierin Q_m nach (A. 14), so erhält man die bekannte Entwicklung für die totale Streumatrix

$$T = \sum_n T_n + \sum_n T_n R \sum_{m \neq n} T_m + \sum_n T_n R \sum_{m \neq n} T_m R \sum_{l \neq n, m} T_l + \dots \quad (\text{A. 17})$$

Die Mittelung von T über alle Konfigurationen ergibt

$$\langle T \rangle = \sum_n \langle Q_n \rangle \quad (\text{A. 18})$$

$$\begin{aligned}
 \text{mit} \quad \langle Q_n \rangle &= \langle T_n (1 + R \sum_{m \neq n} Q_m) \rangle \\
 &= \langle T_n \rangle + \langle T_n R \sum_{m \neq n} Q_m \rangle \\
 &= \langle T_n \rangle + \langle T_n \rangle R \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle + \langle T_n R \sum_{m \neq n} Q_m \rangle - \langle T_n \rangle R \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle .
 \end{aligned}$$

Es ist $\langle T_n \rangle R \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle = \langle T_n R \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle \rangle$, so daß

$$\langle Q_n \rangle = \langle T_n \rangle (1 + R \sum_{m \neq n} \langle Q_m \rangle) + \langle T_n R \sum_{m \neq n} (Q_m - \langle Q_m \rangle) \rangle . \quad (\text{A. 19})$$

Der zweite Term auf der rechten Seite von (A. 19) beschreibt im wesentlichen die mittlere Abweichung der Streuung an allen Streuzentren $m \neq n$ für eine vorgegebene Konfiguration vom Mittelwert dieser Streuung. In der Coherent Potential Approximation wird dieser Beitrag vernachlässigt, d.h. der Rest des Kristalls wird als effektives Medium mit $Q_m = \langle Q_m \rangle$ behandelt.

Aus $\sum_{m \neq n} Q_m = T - Q_n$ folgt damit

$$\langle Q_n \rangle = \langle T_n \rangle (1 + R \langle T \rangle - R \langle Q_n \rangle)$$

oder

$$\langle Q_n \rangle = (1 + \langle T_n \rangle R)^{-1} \langle T_n \rangle (1 + R \langle T \rangle) . \quad (\text{A. 20})$$

Setzt man (A. 18) in (A. 8) ein und benutzt das Ergebnis (A. 20), so findet man

$$H_{\text{eff}} = K + \sum_n (1 + \langle T_n \rangle R)^{-1} \langle T_n \rangle \quad (\text{A. 21})$$

Statt (A. 9) garantiert jetzt

$$\langle T_n [K] \rangle = 0 \quad , \quad (\text{A. 22})$$

daß $H_{\text{eff}} = K$ wird.

In der tight-binding Formulierung ist

$$\begin{aligned} H &= \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| + \sum_{n \neq m} |n\rangle t_{nm} \langle m| \\ K &= \sum_n |n\rangle u(z) \langle n| + \sum_{n \neq m} |n\rangle t_{nm} \langle m| \end{aligned} \quad (\text{A. 23})$$

also

$$H - K = \sum_n |n\rangle (\epsilon_n - u(z)) \langle n| = \sum_n V_n \quad (\text{A. 24})$$

mit

$$V_n = |n\rangle (\epsilon_n - u(z)) \langle n| = |n\rangle V_n \langle n|$$

Damit und mit Hilfe von (A. 15) folgt für die Streumatrix T_n

$$\begin{aligned} T_n &= |n\rangle V_n \langle n| + |n\rangle V_n \langle n| R_n V_n \langle n| + \dots \\ &= |n\rangle (1 - V_n \langle n| R_n \langle n|)^{-1} V_n \langle n| \\ &= |n\rangle \cdot t_n \langle n| \quad . \end{aligned} \quad (\text{A. 25})$$

$\langle t_n \rangle = 0$ ergibt die bekannte CPA-Selbstkonsistenzgleichung (II, 1.7) zur Bestimmung von $u(z) = \Sigma(z)$.

(b) Locator Formulierung der CPA

Die im vorhergehenden Abschnitt beschriebene T-Matrix-Formulierung der CPA folgt im wesentlichen der Arbeit von Velický et al.¹² Eine dazu äquivalente Methode, die sich des sog. Locator-Konzepts¹⁶ bedient, wurde zuerst von Shiba¹⁷ und Brouers¹⁸ vorgeschlagen. Ausgangspunkt ist wiederum die Gleichung (A. 1). In der Wannier- oder tight-binding-Darstellung lautet sie

$$(z - \epsilon_i) G_{ij} + \sum_{l \neq i} t_{il} G_{lj} = \delta_{ij} \quad (\text{A. 26})$$

oder

$$G_{ij} = g_i \delta_{ij} + g_i \sum_{l \neq i} t_{il} G_{lj} \quad (\text{A. 27})$$

ϵ_i ist wie üblich das atomare Energieniveau für ein Elektron am Platz i , in der Legierung ist $\epsilon_i = \epsilon_{A(B)}$. Die Hopping-Integrale t_{ij} mögen nicht von der Konfiguration abhängen. Die Größe $g_i = (z - \epsilon_i)^{-1}$ bezeichnet den Locator des i -ten Gitterplatzes. Iteriert man Gleichung (A. 27) für $i=j$, so erhält man

$$G_{ii} = (g_i^{-1} - \Delta_i)^{-1} \quad (\text{A. 28})$$

Die "Hopping-Selbstenergie" Δ_i für den Gitterplatz i ist durch die folgende Entwicklung gegeben

$$\Delta_i = \sum_{l \neq i} t_{il} g_l t_{li} + \sum_{\substack{l \neq i \\ l' (\neq i, l)}} t_{il} g_l t_{ll'} g_{l'} t_{l'i} + \dots \quad (\text{A. 29})$$

Die Summationen in (A. 29) berücksichtigen alle möglichen "Wege", die vom Platz i ausgehen und dort enden, ohne jedoch zwischendurch nach i zurückzukehren. Ersetzt man die Potentiale an den Plätzen $j \neq i$ durch ein mittleres Potential, d.h. $g_j = (z - \epsilon_j)^{-1}$ usf. in (A. 29) durch $g = (z - \Sigma)^{-1}$, so ist Δ_i identisch mit U aus

$$F = (g^{-1} - U)^{-1} . \quad (\text{A. 30})$$

F ist die lokale Greenfunktion durch das durch Σ beschriebene effektive Medium. Folglich ist

$$\begin{aligned} \Delta_i &= U = g^{-1} - F^{-1} = z - \Sigma - F^{-1} \\ &= z - \Sigma - \frac{1}{N} \sum_k (z - \epsilon_k - \epsilon_k)^{-1} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A. 31})$$

ϵ_k ist wie in (II, 2.22) definiert. Die lokale Greenfunktion G_{ii} in (A. 28) - sie wird jetzt mit F_i bezeichnet - hängt damit nur noch von der Konfiguration des i-ten Gitterplatzes ab.

$$F_{A(B)} = (F^{-1} - (\epsilon_{A(B)} - \Sigma))^{-1} \quad (\text{A. 32})$$

F_i wird identisch mit der in Kapitel II definierten Greenfunktion G_{ii}^i , wenn F_A und F_B die folgende Selbstkonsistenzgleichung erfüllen

$$F = x F_A + (1-x) F_B \quad (\text{A. 33})$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß (A. 33) äquivalent zu (II, 1.12) bzw. (II, 1.13) ist.

(c) CPA mit konfigurationsabhängigen Hopping-Integralen

Mit Hilfe der Locator-Methode läßt sich die CPA auf konfigurationsabhängige Hopping-Integrale erweitern. Das Verfahren wurde zuerst von Blackman et al.¹⁹ entwickelt, wir geben hier eine einfachere Formulierung²⁷.

Neben den atomaren Energieniveaus ϵ_i möge nun auch das Hopping-Integral t_{ij} von der Konfiguration in der Legierung abhängen

$$t_{ij} = \begin{cases} \alpha_{ij} & \text{falls } i \text{ und } j \text{ mit A-Atom besetzt} \\ \beta_{ij} & \text{falls } i \text{ und } j \text{ mit B-Atom besetzt} \\ \zeta_{ij} & \text{falls ein Gitterplatz mit A-Atom} \\ & \text{und der andere mit B-Atom besetzt ist.} \end{cases} \quad (\text{A. 34})$$

x_i und y_i seien "Besetzungszahlen", derart daß

$$\begin{aligned} x_i &= 1, y_i = 0 && \text{falls } i \text{ mit A-Atom besetzt} \\ x_i &= 0, y_i = 1 && \text{falls } i \text{ mit B-Atom besetzt ist} \end{aligned} \quad (\text{A. 35})$$

Aus diesen Definitionen folgen die Relationen

$$x_i y_i = 0 \quad \text{und} \quad x_i^2 = x_i$$

$$\langle x_i \rangle = x = \text{Konzentration der A-Komponente}$$

$$\langle y_i \rangle = y = (1-x) = \text{Konzentration der B-Komponente}$$
(A. 36)

Die Entwicklung (A. 27) läßt sich damit schreiben

$$G_{ij} = g_i \delta_{ij} + g_i \sum_{j \neq i} (x_i x_j x_i + x_i y_j y_i + y_i x_j x_i + y_i y_j y_i) G_{ij} \quad (\text{A. 37})$$

Mit Hilfe von (A. 37) werden folgende Größen definiert

$$G_{ij}^{AA} = x_i G_{ij} x_j, \quad G_{ij}^{BB} = y_i G_{ij} y_j$$

und

$$G_{ij}^{AB} = x_i G_{ij} y_j, \quad G_{ij}^{BA} = y_i G_{ij} x_j,$$

die die Matrixgleichung

$$\hat{G}_{ij} = \hat{g}_i \delta_{ij} + \hat{g}_i \sum_{j \neq i} \hat{t}_{ij} \hat{G}_{ij} \quad (\text{A. 38})$$

erfüllen¹⁹. Dabei ist

$$\hat{G}_{ij} = \begin{pmatrix} G_{ij}^{AA} & G_{ij}^{AB} \\ G_{ij}^{BA} & G_{ij}^{BB} \end{pmatrix}_{ij}, \quad \hat{g}_i = \begin{pmatrix} x_i g_A & 0 \\ 0 & y_i g_B \end{pmatrix}, \quad \hat{t}_{ij} = \begin{pmatrix} \alpha & \zeta \\ \zeta & \beta \end{pmatrix}_{ij} \quad (\text{A. 39})$$

$\hat{t}_{ij}$ hängt nicht mehr von der Konfiguration ab, die gesamte Konfigurationsabhängigkeit ist wie in (A. 27) in dem (Matrix-) Locator $\hat{g}_i$ enthalten. Die Locator-Methode der CPA kann also formal auf (A. 38) übertragen werden. Führt man die Matrix $\hat{U}$ ein

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} U_1 & U_3 \\ U_3 & U_2 \end{pmatrix},$$

so lautet das Analogon zu (A. 33)

$$\hat{\gamma} = x (\hat{g}_A^{-1} - \hat{U})^{-1} + (1-x) (\hat{g}_B^{-1} - \hat{U})^{-1}$$

bzw.

(A. 40)

$$\hat{\gamma} = F[\hat{U}] = \frac{1}{N} \sum_k (\hat{\gamma}^{-1} + \hat{U} - \epsilon_k)^{-1}.$$

Schreibt man (A. 40) komponentenweise, so erhält man nach einigen algebraischen Umformungen

$$\begin{pmatrix} x(g_A^{-1} - U_1)^{-1} & 0 \\ 0 & (1-x)(g_B^{-1} - U_2)^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_A & 0 \\ 0 & \gamma_B \end{pmatrix} \quad (A. 41)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k \begin{pmatrix} \gamma_A^{-1} + U_1 - \alpha_k & U_3 - \epsilon_k \\ U_3 - \epsilon_k & \gamma_B^{-1} + U_2 - \beta_k \end{pmatrix}^{-1}$$

also drei Selbstkonsistenz-Gleichungen zur Bestimmung von γ_A , γ_B und U_3 .¹⁹

ANHANG B

Ableitung der Symmetrie-Relationen (II, 2.18) für die Komponenten der Matrix-Greenfunktion $\hat{G}$

Wir schreiben die Operator-Gleichung (II, 2.17) in der Form

$$\hat{G}(\omega_n) = (\omega_n \hat{1} - \hat{D} - \hat{W})^{-1}. \quad (\text{B. 1})$$

Für ein periodisches System ist $\hat{G}$ diagonal in der Bloch-Darstellung

$$\langle \tilde{k}' | \hat{G}(\omega_n) | \tilde{k} \rangle = \delta_{\tilde{k}\tilde{k}'} \hat{G}_{\tilde{k}}(\omega_n) \quad (\text{B. 2})$$

wobei $(\omega = i\Omega_n, \Omega_n \in \mathbb{R})$

$$\begin{aligned} \hat{G}_{\tilde{k}}(\omega_n) &= \frac{1}{(\omega_n - \varepsilon_j - \varepsilon_K)(\omega_n + \varepsilon_j + \varepsilon_K) - |\Delta_j|^2} \begin{pmatrix} \omega_n + \varepsilon_j + \varepsilon_K & \Delta_j \\ \Delta_j^* & \omega_n - \varepsilon_j - \varepsilon_K \end{pmatrix} \\ &= \frac{-1}{\Omega_n^2 + (\varepsilon_j + \varepsilon_K)^2 + |\Delta_j|^2} \begin{pmatrix} i\Omega_n + \varepsilon_j + \varepsilon_K & \Delta_j \\ \Delta_j^* & i\Omega_n - \varepsilon_j - \varepsilon_K \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B. 3})$$

In irgendeiner anderen Darstellung ist

$$\hat{G}_{\lambda\lambda'}(\omega_n) \equiv \langle \lambda | \hat{G}(\omega_n) | \lambda' \rangle = \sum_{\tilde{k}} \langle \lambda | \tilde{k} \rangle \hat{G}_{\tilde{k}}(\omega_n) \langle \tilde{k} | \lambda' \rangle \quad (\text{B. 4})$$

also

$$G_{\lambda\lambda'}^{11}(\omega_n) = - \sum_k \frac{\langle \lambda | \underline{k} \rangle (i\Omega_n + \varepsilon_i + \varepsilon_k) \langle \underline{k} | \lambda' \rangle}{\Omega_n^2 + (\varepsilon_i + \varepsilon_k)^2 + |\Delta_i|^2}$$

$$G_{\lambda\lambda'}^{22}(\omega_n) = - \sum_k \frac{\langle \lambda | \underline{k} \rangle (i\Omega_n - \varepsilon_i - \varepsilon_k) \langle \underline{k} | \lambda' \rangle}{\Omega_n^2 + (\varepsilon_i + \varepsilon_k)^2 + |\Delta_i|^2} \quad (\text{B. 5})$$

$$G_{\lambda\lambda'}^{12}(\omega_n) = - \sum_k \frac{\langle \lambda | \underline{k} \rangle \Delta_i \langle \underline{k} | \lambda' \rangle}{\Omega_n^2 + (\varepsilon_i + \varepsilon_k)^2 + |\Delta_i|^2}$$

$$G_{\lambda\lambda'}^{21}(\omega_n) = - \sum_k \frac{\langle \lambda | \underline{k} \rangle \Delta_i^* \langle \underline{k} | \lambda' \rangle}{\Omega_n^2 + (\varepsilon_i + \varepsilon_k)^2 + |\Delta_i|^2}$$

Mit $\langle \lambda | G^+(\omega_n) | \lambda' \rangle = \langle \lambda' | G(\omega_n) | \lambda \rangle^*$

folgen sofort die Relationen (II, 2.18) .

ANHANG C

Ableitung der Selbststromsterkgleichung (II, 2.43) für den effektiven
Ordnungsparameter $\Delta(\omega_r)$ der Legierung

Ausgangspunkt ist die Matrix-Gleichung (II, 2.25). Die (1,2)-Komponente lautet linear in den Δ -Parametern:

$$\begin{aligned}\Delta(\omega_r) &\approx X \Delta_A + Y \Delta_B \\ &- (\varepsilon_A - \Sigma) F^{11} (\Delta_B - \Delta) \\ &+ (\varepsilon_A - \Sigma) F^{12} (\varepsilon_B - \Sigma^*) \\ &- (\Delta_A - \Delta) F^{11*} (\varepsilon_B - \Sigma^*)\end{aligned}$$

Wir schreiben

$$\Delta = X \Delta_A + Y \Delta_B + \zeta,$$

so daß

$$\begin{aligned}\zeta &= - (\varepsilon_A - \Sigma) F^{11} (X (\Delta_B - \Delta_A) - \zeta) \\ &- (\varepsilon_B - \Sigma^*) F^{11*} (Y (\Delta_A - \Delta_B) - \zeta) \\ &+ (\varepsilon_A - \Sigma) (\varepsilon_B - \Sigma^*) g[(X \Delta_A + Y \Delta_B) + \zeta],\end{aligned}\tag{C.3}$$

wobei wir von den Beziehungen (II, 2.35) Gebrauch gemacht haben.

Wir führen die Abkürzungen $a: \equiv \varepsilon_A - \Sigma$

und $b: \equiv \varepsilon_B - \Sigma$

ein. Für $T \rightarrow T_c$ gilt

$$\Sigma \approx x\varepsilon_A + y\varepsilon_B - (\varepsilon_A - \Sigma) F''(\varepsilon_B - \Sigma)$$

oder

$$F'' = \frac{xa + yb}{ab} \quad . \quad (C. 4)$$

Es folgt

$$\zeta = A(x\Delta_A + y\Delta_B) + B(\Delta_A - \Delta_B) \quad (C. 5)$$

mit

$$A = \frac{ab^*g}{1 - aF'' - (bF'')^* - ab^*g} \quad (C. 6)$$

und

$$B = \frac{xaF'' - y(bF'')^*}{1 - aF'' - (bF'')^* - ab^*g} \quad . \quad (C. 7)$$

Es gilt jetzt, die Koeffizienten A und B weiter zu vereinfachen. Dazu drücken wir F^{11} durch (C. 4) aus, ferner schreiben wir

$$\operatorname{Im} F'' = \frac{x|a|^2 + y|b|^2}{|ab|^2} \operatorname{Im} \Sigma \quad (\text{C. 8})$$

Einige einfache algebraische Umformungen ergeben dann

$$A = - \frac{i \operatorname{Im} \Sigma}{\omega_n} \quad (\text{C. 9})$$

und

$$B = - \frac{\omega_n - i \operatorname{Im} \Sigma}{\omega_n} \frac{\operatorname{Im} \Sigma (x^2|a|^2 - y^2|b|^2)}{|ab|^2 \operatorname{Im} F''} \quad (\text{C. 10})$$

Wir zeigen nun, daß

$$- \frac{(x^2|a|^2 - y^2|b|^2) \operatorname{Im} \Sigma}{|ab|^2} \stackrel{!}{=} C \equiv$$

$$\frac{\operatorname{Im} (F'' \Sigma) - (x\varepsilon_A + y\varepsilon_B) \operatorname{Im} F''}{\varepsilon_A - \varepsilon_B} \quad (\text{C. 11})$$

Es ist

$$\operatorname{Im}(F''\Sigma) = \operatorname{Im} F'' \cdot \operatorname{Re} \Sigma + \operatorname{Re} F'' \cdot \operatorname{Im} \Sigma$$

Mit (C. 8) und $\operatorname{Re} F'' = \frac{x|a|^2(\varepsilon_B - \operatorname{Re} \Sigma) + y|b|^2(\varepsilon_A - \operatorname{Re} \Sigma)}{|ab|^2}$

folgt

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{\varepsilon_A - \varepsilon_B} \operatorname{Im} \Sigma \left(\frac{x|a|^2 + y|b|^2}{|ab|^2} \operatorname{Re} \Sigma \right. \\ &\quad + \frac{x|a|^2 \varepsilon_B + y|b|^2 \varepsilon_A}{|ab|^2} - \frac{x|a|^2 + y|b|^2}{|ab|^2} \operatorname{Re} \Sigma \\ &\quad \left. - \frac{(x\varepsilon_A + y\varepsilon_B)(x|a|^2 + y|b|^2)}{|ab|^2} \right) \\ &= \frac{\operatorname{Im} \Sigma (x^2|a|^2 - y^2|b|^2)}{|ab|^2} . \end{aligned}$$

Damit ist die Gültigkeit von (C. 11) bewiesen.

Setzt man nun die Ausdrücke für A und B ein, so folgt die Gleichung (II, 2.43).

ANHANG D

Die Integralgleichungen (II, 3.34) für die lokalen Ordnungsparameter $\phi_{A(B)}$ der Legierung in der Strong-coupling Theorie

Wir setzen die Spektral-Darstellungen (II, 3.32) und (II, 3.33) in die Näherung (I, 3.31 a) ein und erhalten mit Hilfe der (1,2)-Komponente von (II, 3.23) z.B.

$$\begin{aligned} \phi_A(\omega) = & - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \left\{ \operatorname{Im} \left(\frac{\phi_A(\omega')}{\chi_A(\omega')} \right) \int_0^{\omega_0} (I_{ph}^A(\Omega) + \chi I_{ph}^{AA}(\Omega)) d\Omega \right. \\ & + \operatorname{Im} \left(\frac{\phi_B(\omega')}{\chi_B(\omega')} \right) \int_0^{\omega_0} \chi I_{ph}^{AB}(\Omega) d\Omega \\ & + \operatorname{Re} \left(\frac{D}{\chi_A(\omega')} - \frac{\Delta(\omega')}{\omega'} \right) \int_0^{\omega_0} (I_{ph}^A(\Omega) + \chi I_{ph}^{AA}(\Omega)) d\Omega \\ & + \operatorname{Re} \left(\frac{D}{\chi_B(\omega')} - \frac{\Delta(\omega')}{\omega'} \right) \int_0^{\omega_0} I_{ph}^{AB}(\Omega) d\Omega \left. \right\} \times \\ & \left(\frac{f(-\omega') + n(\Omega)}{\omega' + \Omega - \omega} + \frac{f(\omega') + n(\Omega)}{\omega' - \Omega - \omega} \right) \\ & - \mathcal{U}_A \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} f(\omega') \left\{ \operatorname{Im} \left(\frac{\phi_A(\omega')}{\chi_A(\omega')} \right) + \operatorname{Re} \left(\frac{D}{\chi_A(\omega')} - \frac{\Delta(\omega')}{\omega'} \right) \right\} \end{aligned}$$

Aus (II, 3.24) erhalten wir

$$\chi_i(\omega') \simeq (iD + \omega')^2 - \varepsilon_i^2, \quad (D. 2)$$

wobei wir hier die ω' -Renormalisierung vernachlässigt haben. Eine entsprechende Integralgleichung folgt für $\phi_B(\omega)$. Beide Gleichungen sind miteinander gekoppelt und es ist verhältnismäßig schwierig, eine exakte Lösung zu finden. Wir vereinfachen das Problem, indem wir den Imaginärteil von $\phi_{A(B)}$ vernachlässigen⁴. Damit folgt

$$\text{Im} \left(\frac{\phi_{A(B)}(\omega')}{\chi_{A(B)}(\omega')} \right) \simeq \phi_{A(B)}(\omega') \frac{-2D\omega'}{(\omega'^2 - (\varepsilon_{A(B)}^2 + D^2))^2 + 4D^2\omega'^2}$$

und die ω' -Integration über diese Terme liefert verschwindend kleine Beiträge. Wir vernachlässigen daher auf der rechten Seite von (D. 1) alle Terme, die ϕ_A und ϕ_B enthalten.

Der verbleibende Term, der die Elektron-Phonon-Wechselwirkung enthält, liefert bezüglich der ω' -Integration den größten Beitrag für $\omega' \simeq 0$. Wir können deshalb im Integranden in guter Näherung $\frac{D}{\chi_{A(B)}(\omega')}$ durch

$$\frac{D}{\chi_{A(B)}(0)} = - \frac{D}{D^2 + \varepsilon_{A(B)}^2} = - \pi \rho_{A(B)}(0) \quad (D. 3)$$

ersetzen. Für den Coulomb-Beitrag führen wir wie üblich eine "cut-off"-

Energie W_d ein. Für $\omega' < W_d$ ersetzen wir ebenfalls $\chi_{A(B)}(\omega')$ näherungsweise durch $\chi_{A(B)}(0)$. Die Coulomb-Wechselwirkung müssen wir jetzt renormalisieren, um den Fehler auszugleichen, der durch dieses Verfahren entsteht. Wir bezeichnen das renormalisierte intraatomare Coulomb-Integral mit $\bar{U}_{A(B)}$.

Damit folgt

$$\begin{aligned} \phi_A(\omega) \simeq & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\omega'} \operatorname{Re} \Delta(\omega') \cdot \\ & \int_0^{\omega_0} d\Omega \left\{ \rho_A(0) I_{ph}^A(\Omega) + \chi \rho_A(0) I_{ph}^{AA}(\Omega) + \gamma \rho_B(0) I_{ph}^{AB}(\Omega) \right\} \\ & \times \left\{ \frac{f(-\omega') + n(\Omega)}{\omega' + \Omega - \omega} + \frac{f(\omega') + n(\Omega)}{\omega' - \Omega - \omega} \right\} \\ & - \rho_A(0) \bar{U}_A \int_0^{W_d} \frac{d\omega'}{\omega'} \operatorname{Re} \Delta(\omega') (f(-\omega') - f(\omega')) \end{aligned} \quad (D. 4)$$

und man erhält nach einigen einfachen Umformungen die Gleichung (II, 3.34).

ANHANG E

Computer-Programm-Beschreibung zur Berechnung der numerischen Beispiele

Das aufgelistete FORTRAN-Programm TCFIT berechnet die Größen λ , μ^* und T_C für die konfigurationsgemittelte Legierung. Zuerst werden die Eingabe-Daten (Parameter-Werte der reinen Konstituenten, Debye-Temperaturen) eingelesen. Die Subroutine CHIFIT berechnet die Werte für $\frac{\Delta}{D}$, α und β aus einem "Least Square Fit". Für jeden Parametersatz (α , β , $\frac{\Delta}{D}$, x) muß die Gleichung (III, 19) gelöst werden. Die Lösung wird mit Hilfe der Subroutine C261 ermittelt.

C PROGRAMM TCFIT

```

1= DIMENSION PAP(10),T(10),X(10),Y(10),CURR(10),EPLA(30),FFM(10),
2= 1TCALO(30),AKONZ(30),TIP(30),MFSO(5),S(50),L(20),KEY(14),ECK(4),
4= COMMON /N,IZ,IZA,IZB,AL,UA,TA,AA,OA,BL,UB,TB,AB,OB,
5= 1AK(20),T(20),TCE(20),WICHT(20)
6= COMMON /PAR/ D,A,B,CONC
7= EXTERNAL CHI,FCI
8= READ(5,1) /NPAR,M2
9= 1 FORMAT(6I2)
10= READ(5,2) /A,IZ,IZA,IZB
11= 2 FORMAT(4I2)
12= WRITE(6,9) /NPAR,M2,N,IZ,IZA,IZB
13= 3 FORMAT(6I2)
14= READ(5,3) /AL,UA,TA,AA,OA,TOA
15= 3 FORMAT(6F10,5)
16= READ(5,4) /BL,UB,TB,AB,OB,TCE
17= 4 FORMAT(6F10,5)
18= WRITE(6,10) /AL,UA,TA,AA,OA,TOA
19= 10 FORMAT(6F10,5)
20= WRITE(6,11) /BL,UB,TB,AB,OB,TCE
21= 11 FORMAT(6F10,5)
22= DO 5 I=2,N
23= 5 READ(5,6) /AK(I),T(I),TCE(I),WICHT(I)
24= 6 FORMAT(4F10,5)
25= DO 12 I=2,N
26= 12 WRITE(6,12) /AK(I),T(I),TCE(I),WICHT(I)
27= 13 FORMAT(4F10,5)
28= DO 7 I=1,NPAR
29= 7 READ(5,8) /PAR(I),SM(I),KNE(I),CURR(I)
30= 8 FORMAT(4F10,5)
31= DO 14 I=1,NPAR
32= 14 WRITE(6,14) /PAR(I),SM(I),KNE(I),CURR(I)
33= 15 FORMAT(4F10,5)
34= CALL CHIFIT(NPAR,PAR,30,1,NF,CURR,CHI,0.05)
35= D=PAR(1)
36= A=PAR(2)
37= B=PAR(3)
38= PI=3.14159
39= FA=-PI+A
40= FB=-PI+B
41= SA0=TAN(FA)
42= SFB=TAN(FB)
43= M1=N+1
44= M2=M1+2
45= M5=M2+1
46= A(1)=1.0
47= A(M1)=0.1
48= A(M2)=1.0
49= AKONZ(M5)=0.0

```

```

54=      TCE(I)=TCA
55=      TCE(M1)=TCB
64=      DO 17 I=2,M2
65=      READ(5,19) AKONZ(I),TIP(I)
66= 18  FORMAT(2F10.5)
67=      CONZ=AKONZ(I)
68=      AE=CONZ*AA+(1-CONZ)*AB
69=      CALL C261(X,F,FC,-5.0,5.0,0.001,100,100,IER)
70=      IF(IER.EQ. 1) GOTO 13
71=      IF(IER.EQ. 2) GOTO 20
72=      CN=1+CONZ*(X-D)**2+(1-CONZ)*X**2
73=      CA=I2*TA**2*(1+SA0**2)*(CONZ*(1+X-D)**2+(1-CONZ)*
74=      1*(1+X**2)*EXP(AE*(CA-DB)))/(IZA*TIP(I)**2*(1+X**2)*CN)
75=      CB=I2*TB**2*(1+EB0**2)*(1-CONZ)*(1+X**2)+CONZ*(1+
76=      1*(X-D)**2)*EXP(AE*(DB-CA)))/(IZE*TIP(I)**2*(1+X-D)**2)*CN)
77=      EFLA(I)=CONZ*CA+AL+(1-CONZ)*CB+BL
78=      CC=(1+EA0**2)*(1+(X-D)**2)/(1+X**2)*CN)
79=      CD=(1+EB0**2)*(1+X**2)/(1+(X-D)**2)*CN)
80=      UE=CONZ*CC+UA+(1-CONZ)*CD+UB
81=      EFMY(I)=UE*(1+5.0*UE)
82=      TCALC(I)=TIP(I)*EXP(-1.04*(1.0+EFLA(I))*(EFLA(I)-EFMY(I)*
83=      1*(1.0+0.62*EFLA(I))))*1.45
84= 17  CONTINUE
85=      WRITE(6,21)
86= 21  FORMAT(1X,2X,38HWERTE FUER CONZ,LAMBDA,MY,THETA UND TC)
87=      EFLA(1)=AL
88=      EFLA(M5)=BL
89=      EFMY(1)=UA*(1+5.0*UA)
90=      EFMY(M5)=UB*(1+5.0*UB)
91=      TIP(1)=TA
92=      TIP(M5)=TB
93=      TCALC(1)=TCA
94=      TCALC(M5)=TCB
95=      DO 22 I=1,M5
96= 22  WRITE(6,23)AKONZ(I),EFLA(I),EFMY(I),TIP(I),TCALC(I)
97= 23  FORMAT(5(2X,F10.5))
98=      GOTO 27
99= 19  WRITE(6,24)
100= 24  FORMAT(1X,31HND CONVERGENCE AFTER IEND STEPS)
101=      STOP
102= 20  WRITE(6,26)
103= 26  FORMAT(1X,42HUNGLEICHHEIT DER VORZEICHEN NICHT ERREICHT)
104=      STOP
105= 27  END

```



```

186=
187=
188= SUBROUTINE CHIFIT(N,A,DA,AA,AE,CHI,EPS)
189= REAL MI
190= DIMENSION A(20),DA(20),AA(20),AE(20)
191= LOGICAL AC,AD
192= Z1=CHI/A
193= WRITE(6,1)Z1
194= 1 FORMAT(///,5X,27HCHI FUER DIE ANFANGSWERTE =,E12.5)
195= 2 AD=.TRUE.
196= DO 20 I=1,N
197= DIF=DA(I)
198= BZ=A(I)
199= AC=.TRUE.
200= MI=BZ
201= ANF=AA(I)
202= ENDE=AE(I)
203= 3 A(I)=BZ+DIF
204= Z2=CHI(A)
205= IF (Z1 .GT. Z2) GO TO 5
206= DIF=-DIF
207= IF (AC) GO TO 4
208= Z3=Z1
209= Z1=Z2
210= Z2=Z3
211= GO TO 7
212= 4 AC=.FALSE.
213= Z3=Z2
214= GO TO 3
215= 5 BZ=A(I)
216= IF (BZ+DIF .LT. ENDE .AND. BZ+DIF .GT. ANF) GO TO 6
217= A(I)=BZ-DIF
218= BZ=BZ-DIF
219= GO TO 9
220= 6 A(I)=BZ+DIF
221= Z3=CHI(A)
222= IF (Z3 .GE. Z2) GO TO 7
223= Z1=Z3
224= Z2=Z3
225= GO TO 5
226= 7 BZ=BZ+(Z1-Z3)*(Z1+Z3-2.0*Z2)*DIF*0.5
227= A(I)=BZ
228= Z1=MI(A)
229= IF (Z1 .LE. Z2) GO TO 8
230= AC=.TRUE.
231= DIF=DIF*0.5
232= DA(I)=DIF
233= GO TO 3
234= 8 IF (ABS(MI-BZ) .LE. ABS(BZ)*EPS) GO TO 9
235= ANF=.FALSE.
236= 9 WRITE(6,10) I,BZ

```

```

237= 10 FORMAT(15,E12.5)
238= 20 CONTINUE
239= IF (AD) GO TO 22
240= WRITE(6,21)D1
241= 31 FORMAT(12,E12.5)
242= GO TO 3
243= 32 WRITE(6,22)D1
244= 33 FORMAT(12,E12.5)
245= RETURN
246= END
247=
250= OVERDUE TIME C=61 *F*FOT* LI *FI*EF* IUNT* IEND* IEP*
251=0 PREPARE ITERATION
252= IER=0
253= LE=LI
254= IR=RI
255= I=LI
256= TOL=X
257= F=FACT*TOL
258= IF (F+1,1E+1
259= 1 FL=F
260= X=XP
261= TOL=X
262= F=FACT*TOL
263= IF (F+2,1E+2
264= 2 FR=F
265= IF (IISG+1,FL+0.1SG+1,FR+0.1,0.05
266= 35 IF (IUNT,LE, 0) GOTO 40
267= DX=(XR-XL)/IUNT
268= X=XL
269= DO 26 I=1,IUNT
270= X=XD
271= F=FACT
272= IF (FOT*F,LE,EF) GOTO 1
273= IF (F+3,1E+3
274= 35 IF (IISG+1,FL+0.1SG+1,FR+0.1,0.05
275= 36 CONTINUE
276= GOTO 30
277= 37 FR=F
278= IR=
279=0
280=0 BASIC ASSUMPTION FL*FR LESS THAN 0 IS ACHIEVED.
281=0 GENERATE TOLERANCE FOR FUNCTION VALUEI.
282= 3 I=0
283= TOLF=100./EPS
284=0
285=0
286=0 START ITERATION LOOP
287= 4 I=I+1
288=0

```

```

289=C      START BISECTION LOOP
290=      DO 13 K=1,IEND
291=      X=.5*(XL+XR)
292=      TOL=X
293=      F=FCN(TOL)
294=      IF (F) 5,16,5
295=      5 IF (SIGN(1.,F)+SIGN(1.,FR)) 7,6,7
296=C
297=C      INTERCHANGE XL AND XR IN ORDER TO GET THE SAME SIGN IN F AND
298=      6 TOL=XL
299=      XL=XR
300=      XR=TOL
301=      TOL=FL
302=      FL=FR
303=      FR=TOL
304=      7 TOL=F-FL
305=      A=F+TOL
306=      A=A+A
307=      IF (A-FR+(FR-FL)) 8,9,9
308=      8 IF (I-IEND) 17,17,9
309=      9 XR=X
310=      FR=F
311=C
312=C      TEST ON SATISFACTORY ACCURACY IN BISECTION LOOP
313=      TOL=EPS
314=      A=ABS(XR)
315=      IF (A-1.) 11,11,10
316=      10 TOL=TOL+A
317=      11 IF (ABS(XR-XL)-TOL) 12,12,13
318=      12 IF (ABS(FR-FL)-TOL) 14,14,13
319=      13 CONTINUE
320=C      END OF BISECTION LOOP
321=C
322=C      NO CONVERGENCE AFTER IEND ITERATION STEPS FOLLOWED BY IEND
323=C      SUCCESSIVE STEPS OF BISECTION OF STEADILY INCREASING FUNCTION
324=C      VALUES AT RIGHT BOUNDS. ERROR RETURN.
325=      IER=1
326=      14 IF (ABS(FR)-ABS(FL)) 16,16,15
327=      15 X=XL
328=      F=FL
329=      16 RETURN
330=C
331=C      COMPUTATION OF ITERATED X-VALUE BY INVERSE PARABOLIC INTERPOLATION
332=      17 A=FR-F
333=      B=(X-XL)*FL*(1.+F*(A-TOL)) + A*(FR-FL)*(1.-TOL)
334=      DM=X
335=      AM=F
336=      X=XL-B/A
337=      TOL=X
338=      F=FCN(TOL)
339=      IF (F) 18,16,18
340=C

```

```

341=C      TEST ON SATISFACTORY ACCURACY IN ITERATION LOOP
343=      13 TOL=EPS
345=      R=ABS(F)
347=      IF R-1.*20.*20.19
349=      13 TOL=TOL*R
351=      20 IF ABS(F)-TOL-21.*11.*22
353=      21 IF ABS(F)-TOL-16.*16.*22
355=C
357=C      PREPARATION OF NEXT BISECTION LOOP
359=C      22 IF (IGR-1.*F-0.13)*1.*FL-24.*23.*24
361=C      23 R=F
363=C      FR=F
365=C      GO TO 4
367=C      24 FL=F
369=C      AL=F
371=C      R=NM
373=C      FR=FM
375=C      GO TO 4
377=C      END OF ITERATION LOOP
379=C
381=C      ERROR RETURN IN CASE OF WRONG INPUT DATA
383=C      30 IER=2
385=C      31 GOTO 42
387=C      40 WRITE(6,41)
389=C      41 FORMAT(1X,17HUNT *LEINER NULL)
391=C      STOP
393=C      42 RETURN
395=C      END

```

LITERATURVERZEICHNIS

- 1 B.T. Matthias, T.H. Geballe, and V.B. Compton,
Rev. Mod. Phys. 35, 1 (1963),
B.R. Coles, Rev. Mod. Phys. 35, 139 (1963),
E. Bucher, F. Heiniger, J. Muheim, and J. Müller,
Rev. Mod. Phys. 35, 146 (1963).
- 2 B.T. Matthias, Progr. Low Temp. Phys., Vol. II (North Holland
Publ. Co., Amsterdam 1957), p. 138.
- 3 siehe etwa: A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, and I.E. Dzyaloshinski,
Quantum Field Theory in Statistical Physics (Prentice-Hall,
Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1963).
- 4 W.L. McMillan, Phys. Rev. 167, 331 (1968).
- 5 J.J. Hopfield, Phys. Rev. 186, 443 (1969).
- 6 P.W. Anderson, J. Phys. Chem. Sol. 11, 26 (1959).
- 7 H. Lustfeld, J. Low Temp. Phys. 12, 595 (1973).
- 8 P. Soven, Phys. Rev. 178, 1136 (1969).
- 9 J. Bardeen, L. Cooper, and J. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- 10 G. Dummer, Z. Physik 186, 249 (1965).
- 11 G.M. Eliashberg, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 38, 966 (1960)
(Engl. Übers.: Soviet Phys. JETP 11, 696 (1960));
G.M. Eliashberg, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 39, 1437 (1961)
(Engl. Übers.: Soviet Phys. JETP 12, 1000 (1961));
Y. Nambu, Phys. Rev. 117, 648 (1960).
- 12 B. Velický, S. Kirkpatrick, and H. Ehrenreich,
Phys. Rev. 175, 747 (1968).

- 13 J.R. Schrieffer, in Theory of Superconductivity (Benjamin, N. Y., 1964).
- 14 U. Forwegck, Diplomarbeit, FU Berlin (1974).
- 15 S. Kirkpatrick, B. Velický, and H. Ehrenreich, Phys. Rev. B 1, 3250 (1970).
- 16 J.M. Ziman, J. Phys. C (Solid St. Phys.) 2, 1230 (1969);
T. Matsubara and Y. Toyozawa, Progr. Theoret. Phys. 26, 739 (1961).
- 17 H. Shiba, Progr. Theor. Phys. 46, 77 (1971).
- 18 F. Brouers, F. Cyrot-Lackmann and M. Cyrot, Phys. Rev. B 7, 4370 (1973).
- 19 J.A. Blackman, D.M. Esterling and N.F. Berk, Phys. Rev. B 4, 2412 (1971).
- 20 J.Appel and W.Kohn, Phys. Rev. B 4, 2162 (1971).
- 21 D.J.Scalapino, in Superconductivity Vol. I (R.D. Parks Editor, Marcel Dekker, N. Y. 1969).
- 22 D.W. Taylor and P. Vashishta, Phys. Rev. B 5, 4410 (1972).
- 23 K.H. Bennemann and J.W. Garland, in Superconductivity in d- and f-Band Metals, AIP Conference Proceedings No. 4.
Edited by D.H. Douglass, p. 103 (American Institute of Physics, New York, 1972);
J.W. Garland and K.H. Bennemann, ibidem, p. 255.
- 24 G. Kerker and K.H. Bennemann, Sol. St. Commun., Vol.14, 399 (1974);
A. Weinkauff and J. Zittartz, Sol.St. Commun., Vol.14, 365 (1974).
- 25 G. Kerker and K.H. Bennemann, Sol. St. Commun., Vol.15, 29 (1974).
- 26 G. Kerker und K.H. Bennemann, wird veröffentlicht.
- 27 G. Kerker, Phys. Lett. 48A, 345 (1974).

28 siehe z.B. J.C. Phillips, in Superconductivity in d- and f-Band Metals, AIP Conference Proceedings No.4 edited by D.H. Douglass, p. 339 (American Institute of Physics, New York, 1972);

U. Haufe, G.Kerker and K.H. Bennemann, wird veröffentlicht in Journal de Physique.

ACKNOWLEDGMENTS

Die numerischen Rechnungen wurden im Rechenzentrum der Freien Universität Berlin auf einer CDC 6400 CYBER und im Großrechenzentrum für die Wissenschaft Berlin auf dem Telefunken-Rechner TR 440 durchgeführt.

Dem Rechenzentrum der FU danke ich für die großzügige Überlassung des Unterprogramms C261.

Herrn Prof. Dr. K. H. Bennemann, der mich zu dieser Arbeit angeregt hat, danke ich für die zahlreichen wertvollen Diskussionen, die ich während der Anfertigung der Arbeit mit ihm geführt habe.

LEBENS LAUF

Geboren am 30. November 1946 in Worms am Rhein.

Besuch der Grundschule in Harxheim-Zell bei Worms von 1953 bis 1957.

Wechsel an das Staatl. Gauß-Gymnasium zu Worms.

Reifeprüfung 1966.

Studium der Physik mit Beginn des Sommersemesters 1966 an der Universität Mainz.

Wechsel an die Freie Universität Berlin im Wintersemester 1966/67.

Vordiplom-Prüfung im Sommersemester 1968 an der FU Berlin.

Hauptstudium an der FU. Diplom-Arbeit über ein Thema aus der theoretischen Hochenergiephysik.

Diplom-Hauptprüfung an der FU im Wintersemester 1971/72.

Wechsel an die Universität Heidelberg zum Sommersemester 1972.

Rückkehr an die FU Berlin im Wintersemester 1972/73.

Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für theoretische Festkörperphysik.

Arbeiten und Veröffentlichungen über Probleme der Supraleitung, der Legierungstheorie und der Oberflächenphysik zusammen mit Prof. K.H.Bennemann.

Promotion im Wintersemester 1974/75.

Ab 1. Januar 1975 wissenschaftlicher Assistent am Institut für theoretische Festkörperphysik der FU Berlin.

